

# Estudo numérico de instabilidades elásticas numa micro bifurcação

DELFIM AUGUSTO NOBRE DOS REIS TEIXEIRA

Supervisor:

Prof. Dr. Alexandre Miguel Prior Afonso

Co-Supervisor:

Prof. Dr. Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho

Co-Supervisor:

Prof. Dr. Manuel António Moreira Alves

Tese submetida com vista à obtenção do grau de  
Mestre em Engenharia Mecânica  
pela Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

---

Porto, Julho 2017



# Agradecimentos

Antes de mais gostaria de expressar a minha gratidão ao Prof. Dr. Alexandre M. P. Afonso, não só pela oportunidade de trabalhar com ele participando neste projeto, mas também pela constante disponibilidade e apoio prestado, que sempre foram mais do que eu merecia.

Um grande abraço e um obrigado a todos os meus colegas e aos meus amigos por estarem sempre por perto para me manterem são, por percorrerem este caminho longo comigo e por me ajudarem a não desviar dele.

Por fim, o mais importante, gostaria de agradecer a toda a minha família, principalmente aos meus pais e à minha irmã Catarina, obrigado por serem como são, por sempre me apoiarem, por aceitarem-me como sou e por nunca duvidarem de mim.





# Resumo

O crescente interesse na investigação de fluidos viscoelásticos e a natureza imprevisível e pouco conhecida destes escoamentos bem como a falta de investigação para a configuração geométrica adotada são algumas das motivações para o desenvolvimento deste estudo numérico. Foram investigados escoamentos numa bifurcação *cross-slot*, com uma configuração de caudais de entrada adjacentes não-convencional, recorrendo ao *software* OpenFOAM e fazendo uso do *solver rheoFoam* desenvolvido por Pimenta e Alves [1], aplicando os modelos constitutivos UCM, Oldroyd-B e sPTT.

Inicialmente procedeu-se à validação do método numérico e foi estimada a incerteza associada à malha escolhida. Na discretização da equação da quantidade de movimento foi descartado o termo da inércia, pelo que todos os fenómenos observados são de natureza puramente elástica e viscosa.

Foi verificado, para este caso de estudo, que o aumento na elasticidade do escoamento causa o aparecimento de certos fenómenos como recirculações e zonas de elevadas tensões de corte, bem como regiões de escoamento de natureza extensional. Não foi detetado nenhum caso de regime assimétrico estacionário, pelo que a única instabilidade reportada é a transição para escoamento não-estacionário, que ocorre para valores mais elevados do número de Weissenberg. Concluiu-se também que a adição de um solvente viscoso ( $\beta \neq 0$ ), através do modelo Oldroyd-B, estabiliza o escoamento (a transição ocorre a números de Weissenberg mais elevados), assim como acontece no modelo sPTT, ao limitar a extensão das moléculas ( $\varepsilon \neq 0$ ). Tanto o aumento de  $\beta$  como de  $\varepsilon$  provocam um aumento do valor crítico de  $Wi$  de transição para regime não-estacionário.

Foi também efetuado um estudo do escoamento em regime não-estacionário e observou-se que para valores de elasticidade próximos do crítico as oscilações são harmónicas com frequências bem definidas. Verificou-se também que o aumento da elasticidade intensifica as oscilações até que o escoamento se torna caótico, libertando quase periodicamente enormes quantidades de energia.



# Abstract

The growing interest on viscoelastic fluid flows and their unexpected behaviour under strong elastic forces were part of the motivation for the development of this numerical investigation. In this thesis the flow of viscoelastic fluids was investigated in a *cross-slot* micro-geometry, with an unconventional adjacent inlet configuration. The simulations were carried out in the open-source OpenFOAM software using the solver *rheoFoam* developed by Pimenta and Alves [1] for the UCM, Oldroyd-B and sPTT constitutive models.

First we validated the numerical method and also estimated the uncertainty of the calculations associated with the chosen mesh. The velocity divergent term in the momentum equation was neglected therefore only viscoelastic creeping flow is considered.

It was seen that the increase in flow elasticity causes such phenomena as flow recirculation and localized high shear stresses to appear, as well as flow regions of high compressive nature. No steady asymmetric flow pattern state was observed, meaning that the only occurring instability was the transition to unsteady flow that occurs at high Weissenberg number flows. Adding a Newtonian solvent ( $\beta \neq 0$ ), using the Oldroyd-B fluid model, stabilizes the flow, very much as with the extensibility parameter ( $\varepsilon \neq 0$ ) for the sPTT model. This means that both  $\beta$  and  $\varepsilon$  increase the value of the critical Weissenberg number for transition to unsteady flow.

The unsteady flow regime was also analysed and it was found that flows with  $Wi$  close to the critical value show harmonic oscillations with well defined frequencies. The increase in elasticity intensifies the oscillations until the point where the flow becomes chaotic, releasing large amounts of energy in a nearly periodic fashion.



# Conteúdos

<b>Conteúdos</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>iv</b>
<b>Lista de tabelas</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de símbolos e abreviaturas</b>	<b>xi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Enquadramento do tema e sua motivação . . . . .	1
1.2 Objetivos . . . . .	2
1.3 Estrutura da tese . . . . .	3
<b>2 Revisão bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Fluidos viscoelásticos . . . . .	5
2.2 Escoamento numa bifurcação ( <i>cross-slot</i> ) . . . . .	6
<b>3 Equações governativas e método numérico</b>	<b>11</b>
3.1 Equações governativas . . . . .	11
3.2 Equações constitutivas . . . . .	11
3.3 Método numérico . . . . .	12
3.4 Técnicas de estabilização numérica para simulações de viscoelásticos	13
3.4.1 Técnica de difusão nos dois lados . . . . .	13
3.4.2 Conformação logarítmica do tensor das tensões . . . . .	13
3.4.3 Algoritmo de acoplamento pressão-velocidade . . . . .	14
3.4.4 Algoritmo de acoplamento tensão-velocidade . . . . .	15
3.4.5 Esquemas de alta resolução . . . . .	15
3.5 Modelos constitutivos . . . . .	16
3.5.1 Modelo convectivo superior de Maxwell (UCM) e modelo Oldroyd-B . . . . .	17
3.5.2 Modelo Phan-Thien Tanner simplificado (sPTT) . . . . .	17
3.6 Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	17
<b>4 Descrição do software</b>	<b>19</b>
4.1 Organização de pastas . . . . .	19
4.2 Pré-processamento . . . . .	20
4.2.1 Criação da malha . . . . .	20
4.2.2 Condições de fronteira . . . . .	21
4.2.3 Equações discretizadas e solução . . . . .	21

4.2.4	Controlo da simulação . . . . .	22
4.3	Iniciar uma simulação . . . . .	22
4.4	Pós-processamento . . . . .	22
4.5	Considerações finais . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Verificação do método numérico</b>	<b>25</b>
<b>6</b>	<b>Resultados</b>	<b>29</b>
6.1	Diagramas de estabilidade . . . . .	29
6.2	Regime estacionário . . . . .	31
6.2.1	Modelo UCM . . . . .	31
6.2.1.1	Velocidade . . . . .	31
6.2.1.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	33
6.2.1.3	Tensão de corte . . . . .	34
6.2.1.4	Diferença das tensões normais . . . . .	35
6.2.2	Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.1$ . . . . .	37
6.2.2.1	Velocidade . . . . .	37
6.2.2.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	38
6.2.2.3	Tensão de corte . . . . .	39
6.2.2.4	Diferença das tensões normais . . . . .	40
6.2.3	Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.5$ . . . . .	41
6.2.3.1	Velocidade . . . . .	41
6.2.3.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	42
6.2.3.3	Tensão de corte . . . . .	43
6.2.3.4	Diferença das tensões normais . . . . .	44
6.2.4	Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.9$ . . . . .	46
6.2.4.1	Velocidade . . . . .	46
6.2.4.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	48
6.2.4.3	Tensão de corte . . . . .	49
6.2.4.4	Diferença das tensões normais . . . . .	50
6.2.5	Modelo sPTT - $\varepsilon = 0.02$ e $\beta = 0$ . . . . .	52
6.2.5.1	Velocidade . . . . .	52
6.2.5.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	53
6.2.5.3	Tensão de corte . . . . .	54
6.2.5.4	Diferença das tensões normais . . . . .	56
6.2.6	Modelo sPTT - $\varepsilon = 0.02$ e $\beta = 0.1$ . . . . .	57
6.2.6.1	Velocidade . . . . .	57
6.2.6.2	Tipo de escoamento ( <i>flowType</i> ) . . . . .	58
6.2.6.3	Tensão de corte . . . . .	59
6.2.6.4	Diferença das tensões normais . . . . .	60
6.3	Regime não-estacionário . . . . .	61
6.3.1	Modelo UCM . . . . .	61
6.3.1.1	Variação dos campos no tempo . . . . .	63
6.3.2	Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.1$ . . . . .	69
6.3.3	Oldroyd-B - $\beta = 0.5$ . . . . .	71
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Ficheiros do <i>rheoFOAM</i></b>	<b>79</b>

---

A.1	<i>blockMeshDict</i>	80
A.2	<i>boundary</i>	83
A.3	<i>constitutiveProperties</i>	85
A.4	<i>controlDict</i>	86
A.5	<i>fvSchemes</i>	89
A.6	<i>fvSolution</i>	91
	Conteúdos	





# Lista de Figuras

2.1	Representação de uma bifurcação cross-slot (reproduzida de Afonso et al. [2]). . . . .	7
2.2	Comparação entre os resultados experimentais obtidos por Arratia et al. [3] (a, b) e os resultados numéricos obtidos por Poole et al. [4] (c, d). . . . .	8
2.3	Representação esquemática da microgeometria utilizada (a) e ilustrações do escoamento com comportamento estável para $Wi=0.3$ (b), assimétrico para $Wi=1.4$ (c) e dependente do tempo para $Wi=7.3$ (d) [9]. . . . .	10
3.1	Volume de controlo - orientação das faces. W (oeste de "west"), E (este), S (sul), N (norte), B (bottom), T (top). Figura reproduzida de [21]. . . . .	12
4.1	Estrutura do diretório de um caso em OpenFOAM (figura retirada do manual [23]). . . . .	20
5.1	Representação esquemática da micro-geometria cross-slot, onde $U$ é a velocidade média imposta nas entradas e $H$ é a largura característica dos canais. . . . .	25
5.2	Malha representativa do domínio físico do caso de estudo (M51). . .	26
5.3	Variação do $Wi$ crítico em função do tamanho mínimo das células de cada malha usada e outras simulações realizadas. . . . .	28
6.1	Diagrama de estabilidade dos modelos constitutivos UCM ( $\beta = 0$ ) e Oldroyd-B ( $\beta = 0.1, 0.5$ e $0.9$ ). . . . .	29
6.2	Diagrama de estabilidade do modelo constitutivo sPTT, com $\varepsilon = 0.02$ . . .	30
6.3	Diagrama de estabilidade do modelo constitutivo sPTT, com $\varepsilon = 0.25$ . . .	30
6.4	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.4$ , (c) $Wi=0.8$ e (d) $Wi=1.26$ (crítico). . . . .	32
6.5	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.4$ , (c) $Wi=0.8$ e (d) $Wi=1.26$ (crítico). . . . .	33
6.6	Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.4$ , (c) $Wi=0.8$ e (d) $Wi=1.26$ (crítico). . . . .	35

6.7	Mapas da primeira diferença das tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.4$ , (c) $Wi=0.8$ e (d) $Wi=1.26$ (crítico). . . . .	36
6.8	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.5$ , (c) $Wi=1$ e (d) $Wi=1.625$ (crítico). . . . .	37
6.9	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.5$ , (c) $Wi=1$ e (d) $Wi=1.625$ (crítico). . . . .	38
6.10	Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.5$ , (c) $Wi=1$ e (d) $Wi=1.625$ (crítico). . . . .	39
6.11	Mapas da diferença de tensões normais ( $N_1/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.5$ , (c) $Wi=1$ e (d) $Wi=1.625$ (crítico). . . . .	40
6.12	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.7$ , (c) $Wi=1.4$ e (d) $Wi=2.05$ (crítico). . . . .	42
6.13	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.7$ , (c) $Wi=1.4$ e (d) $Wi=2.05$ (crítico). . . . .	43
6.14	Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.7$ , (c) $Wi=1.4$ e (d) $Wi=2.05$ (crítico). . . . .	44
6.15	Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=0.7$ , (c) $Wi=1.4$ e (d) $Wi=2.05$ (crítico). . . . .	45
6.16	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.8$ , (c) $Wi=3.5$ e (d) $Wi=5.35$ (crítico). . . . .	47
6.17	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.5$ , (c) $Wi=3.5$ e (d) $Wi=5.35$ (crítico). . . . .	48
6.18	Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas para para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.8$ , (c) $Wi=3.5$ e (d) $Wi=5.35$ (crítico). . . . .	50
6.19	Perfil de tensões normais ( $N_1/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.8$ , (c) $Wi=3.5$ e (d) $Wi=5.35$ (crítico). . . . .	51
6.20	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.5$ , (c) $Wi=3.0$ e (d) $Wi=4.3$ (crítico). . . . .	53
6.21	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.5$ , (c) $Wi=3$ e (d) $Wi=4.3$ (crítico). . . . .	54
6.22	Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.5$ , (c) $Wi=3.0$ e (d) $Wi=4.3$ (crítico). . . . .	55

6.23	Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=1.5$ , (c) $Wi=3.0$ e (d) $Wi=4.3$ (crítico).	56
6.24	Mapas da magnitude da velocidade ( $\ \mathbf{u}\ /U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=7$ , (c) $Wi=13$ e (d) $Wi=17.5$ (crítico).	57
6.25	Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=7$ , (c) $Wi=13$ e (d) $Wi=17.5$ (crítico).	58
6.26	Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=7$ , (c) $Wi=13$ e (d) $Wi=17.5$ (crítico).	59
6.27	Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ; $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=0.1$ , (b) $Wi=7$ , (c) $Wi=13$ e (d) $Wi=17.5$ (crítico).	60
6.28	Variação da componente horizontal da velocidade no centro da geometria ( $x=0$ ; $y=0$ ) e correspondente domínio da frequência para o modelo UCM a (a) $Wi=1.26$ (crítico), (b) $Wi=1.4$ , (c) $Wi=1.8$ e (d) $Wi=2$ .	62
6.29	Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo UCM em função do número de Weissenberg.	63
6.30	Variação temporal da componente horizontal da velocidade no ponto ( $x=0$ ; $y=0$ ) para fluido UCM com $Wi=2$ , com instantes de tempo escolhidos para análise realçados.	64
6.31	Variação do mapa de $\ u\ /U$ ao longo do tempo, para o modelo UCM a $Wi=2$ .	65
6.32	Variação do mapa de ( $\xi$ ) ao longo do tempo, para o modelo UCM a $Wi=2$ .	66
6.33	Variação do mapa de $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ao longo do tempo, para modelo UCM a $Wi=2$ .	67
6.34	Variação do mapa de $N_1/[\eta U/H]$ ao longo do tempo, para o modelo UCM a $Wi=2$ .	68
6.35	Variação da componente horizontal da velocidade no ponto ( $x=0$ ; $y=0$ ) e correspondente domínio da frequência para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a) $Wi=1.625$ (crítico), (b) $Wi=1.7$ , (c) $Wi=1.8$ e (d) $Wi=2$ .	70
6.36	Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) em função do número de Weissenberg.	71
6.37	Variação da componente horizontal da velocidade no ponto ( $x=0$ ; $y=0$ ) e correspondente domínio da frequência para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a) $Wi=2.05$ (crítico), (b) $Wi=2.1$ , (c) $Wi=2.2$ e (d) $Wi=2.3$ .	72
6.38	Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) em função do número de Weissenberg.	73



# Lista de Tabelas

5.1	Dados relativos à validação da malha deste estudo . . . . .	27
6.1	Valores de $Wi$ crítico obtidos para diferentes modelos constitutivos .	31



# Lista de símbolos e abreviaturas

$Re$	Número de Reynolds	[-]
$Wi$	Número de Weissenberg	[-]
$U$	Velocidade característica	[m/s]
	Velocidade média	[m/s]
$H$	Largura característica	[m]
$N_1$	Primeira diferença das tensões normais	[Pa]
$p$	Pressão	[Pa]
$t$	Tempo	[s]
$\mathbf{u}$	Vetor velocidade	[m/s]
$u_i$	Componente $i$ do vetor velocidade	[m/s]
$f$	Frequência	[Hz]
$\alpha$	Parâmetro escalar de esquemas de alta-resolução	[-]
$\beta$	Parâmetro escalar de esquemas de alta-resolução	[-]
	Razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total	[-]
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação do fluido	[s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	Parâmetro de extensibilidade do modelo PTT	[-]
$\eta$	Viscosidade total	[Pa.s]
$\eta_p$	Viscosidade polimérica	[Pa.s]
$\eta_s$	Viscosidade do solvente	[Pa.s]
$\lambda$	Tempo de relaxação do fluido	[s]
$\xi$	Escalar de tipo de escoamento	[-]
$\rho$	Massa volúmica do fluido	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\tau_{ij}$	Componente $ij$ do tensor de tensões	[Pa]

## Abreviaturas

CUBISTA	Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection
PTT	Phan-Thien and Tanner
UCM	Upper-Convected Maxwell
HRS	High-Resolution Schemes
PAA	Polyacrylamide
CFD	Computational Fluid Dynamics





# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Enquadramento do tema e sua motivação

Com a rápida expansão e desenvolvimento, nas últimas décadas, de indústrias como a alimentar, a do petróleo, a farmacêutica, a dos polímeros, e outras que lidam diariamente com, ou produzem, vários fluidos não-newtonianos nos seus processos produtivos, surgiu também um grande interesse em compreender os comportamentos destes fluidos, de forma a poder otimizar estes processos.

No grupo dos fluidos não-newtonianos estão identificados os viscoelásticos (por exemplo, soluções de polímeros ou polímeros fundidos) que são o alvo de estudo desta tese. Estes podem apresentar comportamentos do tipo líquido (viscoso) ou sólido (elástico), dependendo da duração dos esforços a que são submetidos. Os escoamentos de fluidos viscoelásticos possuem mais graus de liberdade, devido à sua configuração estrutural cuja complexidade aumenta com o peso molecular, pelo que são inerentemente não-lineares, exibindo fenómenos muito distintos dos casos newtonianos, para as mesmas condições de escoamento. Diversos modelos constitutivos reológicos têm sido propostos para prever como se comportam estes fluidos em escoamento (ver capítulo 3).

O estudo de fluidos viscoelásticos desenvolveu-se nos anos 80, influenciado principalmente pela indústria dos plásticos e diversas investigações permitiram compreender substancialmente o comportamento de escoamentos destes fluidos em áreas como o processamento de polímeros fundidos, nomeadamente a injeção e extrusão de plásticos. Mais recentemente, os avanços em mecânica dos fluidos computacional e o desenvolvimento de processos que permitem criar microgeometrias de convergência de escoamentos permitiram explorar novos aspetos deste tipo de escoamentos especialmente para soluções poliméricas diluídas [2]. A utilização deste tipo de geometrias de reduzidas dimensões permite analisar escoamentos de fluidos viscoelásticos para condições de inércia desprezáveis. Uma das geometrias mais populares, que será utilizada neste estudo, é a bifurcação *cross-slot*, sendo que a configuração típica consiste em 4 braços ortogonais no mesmo plano cruzados com duas entradas e duas saídas de escoamento.

Para valores reduzidos de elasticidade, o escoamento de um fluido viscoelástico é estacionário, mas distinto do caso newtoniano, para condições semelhantes, e um estudo extenso já foi realizado relativamente a este tipo de escoamentos. No entanto, quando se analisam fluidos com elasticidades superiores começam a surgir fenómenos

associados ao aparecimento de instabilidades de origem puramente elástica. São reportados, tanto em estudos numéricos como experimentais, casos como escoamentos assimétricos em geometrias perfeitamente assimétricas, escoamentos dependentes do tempo com periodicidades bem definidas e escoamentos caóticos com oscilações aparentemente aleatórias. [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]

As instabilidades reportadas são muitas vezes associadas a reduções na dissipação de energia do escoamento e também promovem fenômenos de mistura, o que é bastante difícil de acontecer em escoamentos em geometrias de tão pequena dimensão, devido ao reduzido número de Reynolds.

Apesar da recente e abundante informação obtida acerca de escoamentos de fluidos viscoelásticos, muita da investigação foi efetuada em configurações experimentais que permitem obter valores de número de Reynolds (efeitos de inércia) bastante reduzidos, mas ainda não-desprezáveis, que afetam o comportamento elástico do fluido. É necessária então a realização de mais estudos numéricos, sobretudo em condições em que sejam desprezáveis os efeitos inerciais, obtendo assim escoamentos puramente elásticos e viscosos. Também é importante começar a focar o estudo nas instabilidades oscilatórias que ocorrem em escoamentos de fluidos com elevada elasticidade em microgeometrias como o *cross-slot*, pouco abordadas na literatura.

## 1.2 Objetivos

Nesta tese é abordado o estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos numa bifurcação *cross-slot* (com uma configuração de caudais de entrada adjacentes diferente da típica) e o objetivo é avaliar o seu comportamento para diferentes valores de elasticidade e também analisar o eventual surgimento de instabilidades puramente elásticas, identificando os valores críticos de elasticidade a partir dos quais estas se manifestam. Para os casos de escoamento não-estacionário (periódico), se verificados, é estudada a periodicidade das suas oscilações no tempo.

De modo a facilitar o estudo numérico de fluidos viscoelásticos, sendo possível realizar simulações com maior estabilidade numérica para valores de elasticidade mais elevados, foi desenvolvida por Pimenta e Alves [1] a ferramenta *rheoTool* para o *software* de código aberto OpenFOAM, muito popular em mecânica de fluidos computacional. Nesta ferramenta está incluído o *solver rheoFOAM*, adequado para a previsão, tanto de escoamentos estacionários como não-estacionários, de fluidos viscoelásticos como se realiza neste trabalho. Também é efetuada uma análise de incerteza, utilizando a extrapolação de Richardson [11], para 3 malhas com diferentes graus de refinamento, de modo a descobrir se a incerteza associada à malha escolhida não afeta significativamente os resultados numéricos.

Após a validação do método numérico são efetuadas simulações aplicando o modelo convectivo superior de Maxwell (*Upper Convected Maxwell*, UCM) [12], para escoamentos com valor de  $Wi$  cada vez superior. Este modelo constitutivo é o mais simples e não considera a introdução de um solvente Newtoniano, como no modelo Oldroyd-B [13], ou o parâmetro de extensibilidade das moléculas do modelo simplificado de Phan-Thien e Tanner (sPTT) [14] que são também estudados e comparados nesta tese.

A finalidade deste estudo é compreender um pouco mais sobre os efeitos das instabilidades puramente elásticas de fluidos, mas servir também como base, ou guia, para trabalhos futuros, mais aprofundados, de escoamentos em configurações semelhantes à da bifurcação aqui estudada para os mesmos modelos constitutivos.

## 1.3 Estrutura da tese

Esta tese encontra-se dividida em sete capítulos e um apêndice.

No próximo capítulo 2 é apresentada uma breve revisão bibliográfica do estudo de escoamentos estacionários e não-estacionários de fluidos viscoelásticos em micro-geometrias, com especial ênfase nos estudos realizados com a bifurcação *cross-slot*.

No capítulo 3 são apresentadas as equações que governam os escoamentos em estudo e o método numérico utilizado para as discretizar e resolver. Aqui também são expostos os algoritmos, interpolações e outras técnicas de estabilização numérica disponibilizadas no *solver rheoFoam*.

No capítulo 4 é explicado o funcionamento do *software* OpenFOAM, nomeadamente a organização dos ficheiros e pastas envolvidos num caso de estudo e as funcionalidades de pré e pós-processamento disponíveis. Este capítulo possibilita ao leitor compreender facilmente os fatores mais relevantes na configuração de uma simulação.

No capítulo 5 é feita a validação do método numérico e é calculada a incerteza associada à malha escolhida, através da extrapolação de Richardson.

No capítulo 6 são apresentados os mapas de estabilidade e os resultados do escoamento na bifurcação em regime estacionário, para velocidade, tensão de corte, tensões normais e tipo de escoamento. Para regime não-estacionário são analisadas as oscilações e o comportamento do escoamento.

As conclusões e as sugestões para trabalho futuro são apresentadas no capítulo 7.

No apêndice A são apresentados os conteúdos dos ficheiros principais manipulados num caso de estudo utilizando o *solver rheoFOAM*.



## Capítulo 2

# Revisão bibliográfica

### 2.1 Fluidos viscoelásticos

Para descrever fluidos viscoelásticos, que são o alvo de estudo desta tese, há que primeiro diferenciar fluidos newtonianos de não-newtonianos.

Em escoamentos de corte simples, como o caso do escoamento de Couette, fluidos newtonianos, como a água, seguem uma lei que define uma relação de proporcionalidade entre as tensões de corte e a taxa de deformação,

$$\tau_{xy} = \eta \dot{\gamma} \quad (2.1)$$

onde a viscosidade,  $\eta$  é constante e representa o coeficiente de proporcionalidade. Para fluidos não-newtonianos este não é necessariamente o caso e o valor da viscosidade nestes fluidos varia em função da taxa de deformação (equação 2.2). Outra característica relevante destes fluidos é o aparecimento de tensões normais ( $\tau_{xx}$ ,  $\tau_{yy}$  e  $\tau_{zz}$ ) em escoamentos de corte simples e estacionários, não observadas no caso de fluidos newtonianos. Isto é associado à estrutura molecular dos fluidos não-newtonianos, que possibilita vários graus de liberdade [15].

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \quad (2.2)$$

No domínio dos fluidos não-newtonianos encontramos fluidos cuja viscosidade aumenta com o aumento da taxa de deformação (mistura de água com amido de milho, areias movediças), fluidos cuja viscosidade diminui com a taxa de deformação (iogurte, tintas) e também encontramos fluidos que, quando aplicado um esforço, sofrem não só deformações viscosas (dissipativas), como também deformações elásticas (reversíveis). Soluções de polímeros são exemplos de fluidos viscoelásticos.

Devido à sua elasticidade estes fluidos têm a capacidade de armazenar alguma energia, para além de a dissipar, conferindo-lhes assim uma espécie de memória. Duas características exclusivas de fluidos viscoelásticos são o tempo de retardação e o tempo de relaxação. Ao aplicar uma tensão a um fluido com propriedades elásticas, a sua capacidade de armazenar energia causa um atraso na resposta à tensão (retardação), ao contrário de fluidos puramente viscosos que reagem instantaneamente. Quando a tensão deixa de ser aplicada o fluido tende a recuperar lentamente parte do seu estado inicial, ou seja, o tempo que o fluido demora a recuperar as condições

iniciais é da ordem do tempo de relaxação. Resumindo, o escoamento de fluidos viscoelásticos não depende apenas das condições atuais do fluido, mas depende também da sua história de deformação [15].

Existem diversos modelos de equações constitutivas propostos para descrever este comportamento viscoelástico, sendo que os abordados neste caso de estudo serão os modelos desenvolvidos por Maxwell [12], Oldroyd [13] e Phan-Thien e Tanner [16, 14]. As equações governativas destes modelos serão apresentadas mais adiante neste trabalho.

O número adimensional que relaciona os efeitos de inércia com os efeitos viscosos é o número de Reynolds,  $Re$ , e o seu uso é bastante popular em mecânica dos fluidos para prever o comportamento de escoamentos, nomeadamente, a transição do regime de laminar para turbulento. Pode ser calculado através da expressão seguinte

$$Re = \frac{\rho H U}{\eta} \quad (2.3)$$

onde  $\rho$  é a massa volúmica do fluido,  $H$  é um comprimento característico do escoamento,  $U$  é uma velocidade característica e  $\eta$  a viscosidade do fluido.

A elasticidade de um fluido pode ser caracterizada através do número de Weissenberg ( $Wi$ ) que representa o produto do tempo de relaxação do fluido ( $\lambda$ ) com uma taxa de deformação característica do escoamento ( $\dot{\gamma}$ ), como observado na equação (2.4). Uma vez que  $Wi$  é um número adimensional, a taxa de deformação característica deste escoamento é definida, ao longo deste trabalho, como a razão entre a velocidade característica ( $U$ ) do escoamento e o comprimento característico ( $H$ ).

$$Wi = \lambda \dot{\gamma} = \lambda \frac{U}{H} \quad (2.4)$$

## 2.2 Escoamento numa bifurcação (*cross-slot*)

Com o crescente interesse em finais do século passado na investigação de escoamentos de fluidos viscoelásticos através de microgeometrias, que permitem obter escoamentos de reduzido  $Re$ , resultando em altos valores de  $Wi$ , o estudo de escoamentos extensionais em bifurcações do tipo *cross-slot* tornou-se também bastante popular.

Na figura 2.1 é apresentado o esquema de uma bifurcação *cross-slot* típica, em que o escoamento entra através dos braços a este (E) e Oeste (W) e abandona a bifurcação através dos braços a norte (N) e sul (S). A configuração adotada neste trabalho será bidimensional e bastante semelhante à aqui apresentada, sendo que os caudais neste caso são adjacentes, com entradas a velocidade constante a Norte e Oeste e saídas a Este e Sul.

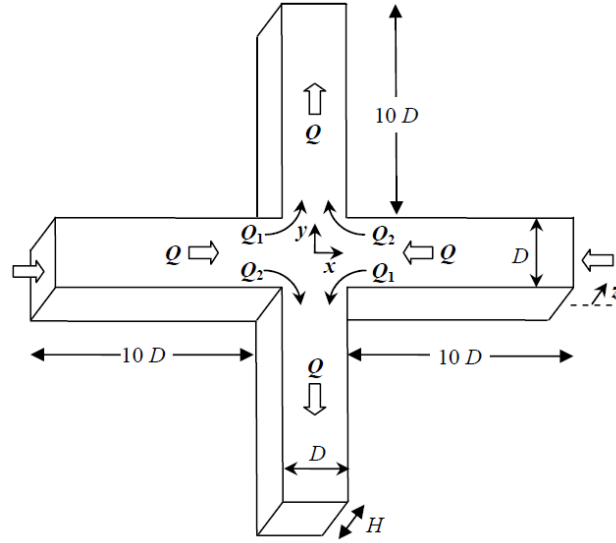


Figura 2.1: Representação de uma bifurcação *cross-slot* (reproduzida de Afonso *et al.* [2]).

Como já referido, a investigação de escoamentos extensionais começou-se a desenvolver sobretudo nos anos 80, devido principalmente à crescente necessidade de medir a viscosidade de soluções poliméricas [2]. Vários estudos foram realizados para escoamentos estáveis em *cross-slot*, como a análise numérica extensiva efetuada por Remmelgas *et al.* [17] para fluidos do tipo FENE (*Finitely Extensible Non-linear Elastic*).

Em Bogaerds *et al.* [18] são comparados resultados experimentais deste tipo de escoamentos com valores obtidos numericamente através dos modelos Giesekus e sPTT. Os dados estão em concordância apesar de serem detetadas discrepâncias entre alguns resultados experimentais e numéricos.

No entanto, é quando se começam a analisar valores de elasticidade superiores que o estudo se torna mais interessante. Isto tornou-se possível graças ao fabrico de microgeometrias, que permitem escoar fluidos viscoelásticos com altos valores de número de Weissenberg e inércia desprezável [2], sendo que os efeitos elásticos predominam nestes casos. Sem dúvida uma das características mais curiosas detetada em escoamentos de fluidos viscoelásticos é a assimetria observada no trabalho de Arratia *et al.* [3]. Analisando o escoamento de soluções poliméricas com diferentes elasticidades numa bifurcação de dimensões reduzidas ( $Re < 10^{-2}$ ) conseguiram detetar uma primeira instabilidade, para  $Wi = 1.5$ , em que o escoamento torna-se assimétrico, mas mantém-se estacionário, como se pode observar na figura 2.2(a, b) e apesar das condições de entrada e saída manterem simetria. Para valores superiores de elasticidade ( $Wi > 4$ ) foi detetada uma segunda instabilidade, em que o escoamento passa a ser dependente do tempo (não-estacionário), para as mesmas condições de entrada do escoamento. Estas instabilidades também promovem a mistura dos escoamentos, fenómeno que ocorre habitualmente em escoamentos com número de Reynolds elevado, inferior ao de transição, muito difícil de obter em microgeometrias, pelo que as instabilidades elásticas apresentam uma boa alternativa.

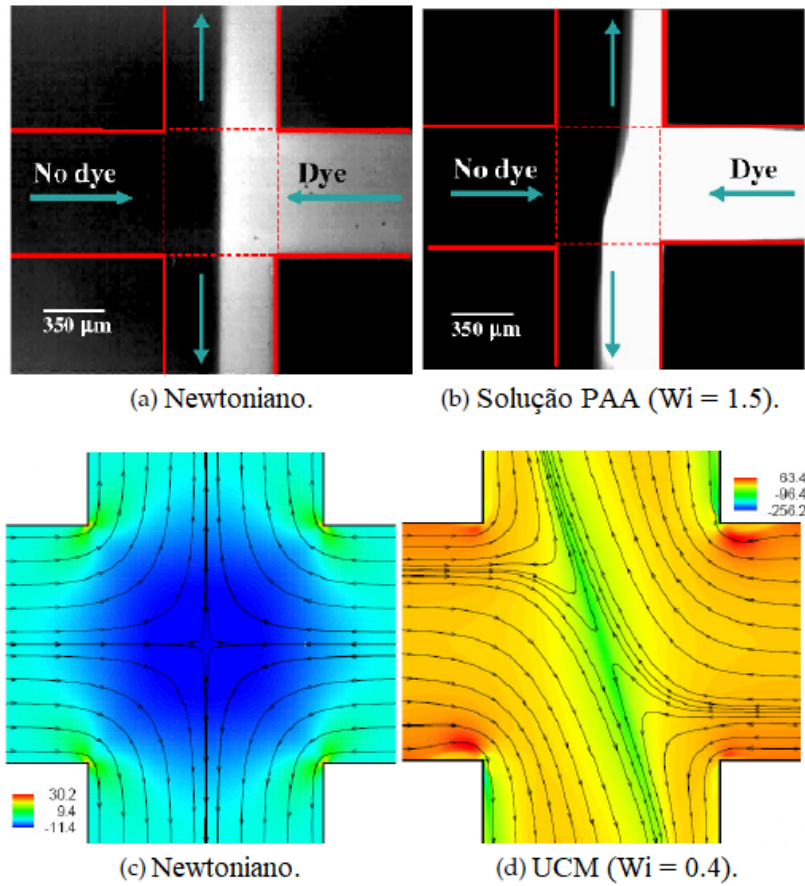


Figura 2.2: Comparação entre os resultados experimentais obtidos por Arratia *et al.* [3] (a, b) e os resultados numéricos obtidos por Poole *et al.* [4] (c, d).

A assimetria quase bidimensional reportada nos resultados experimentais de Arratia *et al.* [3] foi o que inspirou o estudo de Poole *et al.* [4], que foram os primeiros a prever numericamente este fenómeno. Utilizando o modelo convectivo superior de Maxwell (UCM) para simular escoamentos numa geometria *cross-slot* 2D perfeitamente simétrica, com inércia desprezável, os autores conseguiram provar que o surgimento desta assimetria é um efeito puramente elástico. Como podemos ver na figura 2.2(c, d) a partir de um  $Wi$  crítico ( $\approx 0.31$ ) o escoamento continua estável mas adquire uma assimetria que aumenta com a elasticidade. Neste trabalho ainda foram realizadas simulações para diferentes valores de  $Re$ , verificando-se que a inércia tem, de facto, um papel estabilizador nestes efeitos. Aumentando  $Re$  verifica-se que tanto aumenta o valor crítico  $Wi$  como ocorre uma redução no grau de assimetria. É a opinião dos autores que esta assimetria possa derivar da natureza compressiva do escoamento a montante do ponto de estagnação, muito semelhante aos fenómenos de varejamento (*buckling*) que ocorrem em vigas sólidas e no escoamento de jatos de fluidos viscosos. Utilizando uma bifurcação 3D, mas ainda com entradas e saídas no mesmo plano, Poole *et al.* [5] estudaram o efeito



da variação da profundidade da geometria nos fenómenos elásticos. Foi detetada novamente uma fraca assimetria tridimensional que diminui na direção das paredes da bifurcação. Também foi verificado que, diminuindo as dimensões da geometria, a mudança para escoamento não-estacionário dá-se para números de Weissenberg cada vez menores e abaixo de certas profundidades o escoamento assimétrico nunca se desenvolve, devido ao predomínio das forças viscosas que decorre dos elevados gradientes de velocidade nessa direção. Também em Poole *et al.* [6] foi observado que a adição de um solvente viscoso ( $\beta \neq 0$ ) ao modelo UCM, resultando no modelo Oldroyd-B, atrasa o aparecimento da assimetria e a partir de um valor crítico de  $\beta$  deixa de se observar o fenómeno. Introduzindo o parâmetro de extensibilidade ( $\varepsilon \neq 0$ ), com o uso do modelo sPTT, observou-se que além do aumento do valor crítico de  $Wi$ , também o grau da assimetria diminui com o aumento de  $\varepsilon$ .

Mais recentemente, Cruz *et al.* [19] realizaram um estudo numérico bastante mais extenso, onde são apresentados vários resultados relativos a escoamentos numa bifurcação para os modelos UCM, Oldroyd-B e sPTT. Os dados apresentados são de grande precisão e estão de acordo com os estudos anteriores, servindo como uma boa base de comparação para trabalhos futuros.

Haward *et al.* [20] analisaram o escoamento de soluções poliméricas numa bifurcação com um perfil obtido através de otimização numérica, utilizando também o modelo FENE. Nos resultados experimentais pôde ser observada a formação de uma linha de elevada birrefringência acima de um valor crítico de número de Weissenberg.

O estudo numérico realizado por Oliveira *et al.* [7], para escoamentos de fluidos UCM numa bifurcação com 3 entradas de fluido e 1 saída, implementando assim um padrão cinemático do tipo "focagem de escoamento", demonstrou que existe um valor mínimo para a razão de caudais de entrada, a partir do qual se dá aqui também uma transição de escoamento simétrico para escoamento assimétrico. Abaixo deste valor existe apenas um valor crítico de  $Wi$  em que o escoamento muda diretamente de simétrico para dependente do tempo. Na simulação de fluidos sPTT verifica-se novamente uma diminuição do grau da assimetria com o aumento de  $\varepsilon$  e também um aumento do  $Wi$  crítico. Apesar dos valores de tensão normal aumentarem significativamente junto à bifurcação, não existe neste padrão de escoamento um ponto de estagnação, pelo que esta singularidade, característica do *cross-slot* no seu padrão de escoamento típico, não deve ser a única causa da assimetria. Ainda foi feito um balanço energético ao escoamento, de modo a calcular a energia extra que é dissipada devido à bifurcação, relativamente a um escoamento completamente desenvolvido, na configuração pré-crítica. Foi observado que, para altos valores de número de Weissenberg a dissipação extra de energia é mais acentuada para escoamentos onde a simetria é imposta do que com assimetria e que esta diferença aumenta com o aumento de  $Wi$ . Isto indica que o escoamento viscoelástico consome menos energia ao transitar para assimétrico.

Os resultados experimentais de Sousa *et al.* [8], para bifurcações de geometria variável, estão em acordo com os estudos numéricos prévios.

Em investigações mais recentes, para o padrão de "focagem de escoamento", Ballesta *et al.* [9] avaliam o comportamento de soluções poliméricas com diferentes

concentrações e para diferentes taxas de deformação. É observado que, para reduzidas taxas de deformação, o aumento de  $Wi$  eventualmente leva a que o escoamento mude de estável diretamente para periódico e, para valores mais elevados de  $Wi$  este torna-se caótico. Para elevadas taxas de deformação é detetado o surgimento de uma assimetria no escoamento para valores de  $Wi > 0.3$  até ser atingido o estado periódico (ver figura 2.3) e seguidamente o estado caótico.

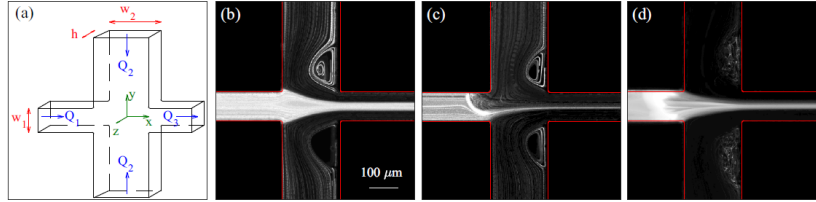


Figura 2.3: Representação esquemática da microgeometria utilizada (a) e ilustrações do escoamento com comportamento estável para  $Wi=0.3$  (b), assimétrico para  $Wi=1.4$  (c) e dependente do tempo para  $Wi=7.3$  (d) [9].

O mapa de estabilidades neste estudo apresenta certas discrepâncias em relação aos resultados numéricos de Oliveira *et al.* [7], que os autores atribuem ao facto da análise numérica ser feita em 2D enquanto que a experiência é feita em geometrias 3D, ou também porque o modelo utilizado no estudo numérico foi o UCM, cuja equação constitutiva não considera a viscosidade reofluidificante. São avaliadas aqui também as oscilações no escoamento em estado periódico, em que é possível relacionar a amplitude e frequência diretamente com a elasticidade do fluido.

No trabalho experimental de Varshney *et al.* [10], para escoamentos de soluções poliméricas numa bifurcação em forma de T, não é observada nenhuma assimetria em regime estacionário como nos casos anteriores. Isto pode ser atribuído ao facto da instalação experimental envolver uma bifurcação *cross-slot* em que um dos braços é devidamente selado. Assim, a configuração muda para uma geometria em T, com um canal de recirculação. Os autores defendem que é a existência deste canal que impede o aparecimento da assimetria. No entanto, ainda foi feita uma análise extensa ao escoamento dependente do tempo, onde é verificado que o aumento contínuo da elasticidade provoca um aumento na frequência e na intensidade das oscilações.

A microgeometria *cross-slot* provou então ser bastante útil para medições de reologia extensional, permitindo facilmente variar a extensão das moléculas poliméricas e também a taxa de deformação [9]. É também bastante útil para analisar o começo das instabilidades puramente elásticas e comparar facilmente os valores experimentais com os numéricos.

É importante também referir que não existe nenhum estudo na literatura para *cross-slot* com a configuração de entradas de escoamento aqui adotada, pelo que esta foi a motivação principal para esta tese.

## Capítulo 3

# Equações governativas e método numérico

Neste capítulo são apresentadas as equações que governam os escoamentos estudados nesta tese, bem como o método numérico utilizado para as resolver.

### 3.1 Equações governativas

Para escoamentos monofásicos, isotérmicos, em condições laminares de fluidos incompressíveis é apresentada a equação de continuidade (3.1) e a equação da quantidade de movimento (3.2),

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}' + \mathbf{f} \quad (3.2)$$

onde  $\mathbf{u}$  representa o vetor velocidade,  $t$  o tempo,  $p$  a pressão,  $\boldsymbol{\tau}'$  é o tensor das tensões e  $\mathbf{f}$  representa qualquer força exterior.

### 3.2 Equações constitutivas

Ao lidar com simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos é habitual dividir o tensor das tensões em dois termos, um relativo ao solvente ( $\boldsymbol{\tau}_s$ ) e um relativo ao polímero ( $\boldsymbol{\tau}$ ), sendo que  $\boldsymbol{\tau}' = \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}_s$ . Torna-se então necessário atribuir equações constitutivas a cada tensor, definidas pelas equações (3.3) e (3.4), mantendo assim fechado o sistema de equações.

$$\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (3.3)$$

$$f(\boldsymbol{\tau})\boldsymbol{\tau} + \lambda(\dot{\gamma})\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_p(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (3.4)$$

onde  $\eta_s$  representa a viscosidade do solvente,  $\eta_p$  representa o coeficiente de viscosidade polimérica,  $\lambda$  representa o tempo de relaxação e  $\dot{\gamma}$  representa a taxa de

deformação.  $f(\boldsymbol{\tau})$  é uma função escalar geral que depende de um invariante de  $\boldsymbol{\tau}$  e  $\nabla \boldsymbol{\tau}$  representa a derivada convectiva superior, definida pela equação (3.5), que torna o modelo independente do referencial escolhido.

$$\nabla \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.5)$$

As equações apresentadas definem o sistema de equações governativas a ser resolvido. No entanto, devido a problemas de estabilidade numérica, o sistema não deve ser resolvido com apenas estas equações e estão por isso disponíveis várias técnicas de estabilização numérica [1], mencionadas mais adiante.

### 3.3 Método numérico

O software de código aberto OpenFOAM, utilizado neste estudo, é dos mais populares em mecânica dos fluidos computacional e baseia-se no método numérico do Volumes Finitos. Com esta metodologia o domínio computacional de cálculo é dividido em vários volumes de controlo onde são calculadas as variáveis do escoamento. O número de células define o refinamento da malha e a validade dos resultados. Para uma malha ortogonal a célula onde são calculadas as equações governativas é designada por célula P, enquanto que as células vizinhas são designadas através de notação geográfica como pode observada na figura 3.1 ou através do índice F, numa formulação mais genérica.

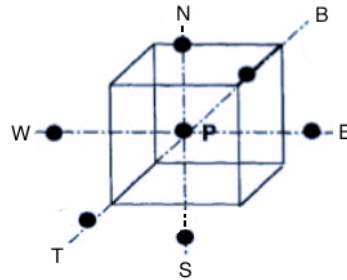


Figura 3.1: Volume de controlo - orientação das faces. W (oeste de "west"), E (este), S (sul), N (norte), B (bottom), T (top). Figura reproduzida de [21].

As malhas aqui utilizadas são malhas colocadas, ou seja, todas as variáveis são calculadas nos mesmos pontos representativos das células, que normalmente são os respetivos centros geométricos das células (nós P e nós vizinhos F). Isto implica a utilização de uma interpolação especial no cálculo dos caudais mássicos que atravessam as faces dos volumes de controlo, de modo a garantir o acoplamento entre os campos de pressão e velocidade. O processo de interpolação utilizado neste código é abordado mais adiante.

### 3.4 Técnicas de estabilização numérica para simulações de viscoelásticos

Como já referido, as equações governativas resolvidas neste estudo numérico não são suficientes para garantir estabilidade numérica, pelo que é necessário aplicar também certas técnicas e métodos de interpolação, de modo a possibilitar o estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos para valores mais elevados de  $Wi$ , que é o alvo de estudo deste trabalho. As abordagens utilizadas, que são disponibilizadas pela ferramenta *rheoTool* [1, 22], são apresentadas neste subcapítulo.

#### 3.4.1 Técnica de difusão nos dois lados

Esta técnica implica apenas a adição de um termo difusivo a cada lado da equação de quantidade de movimento (3.2), sendo que o termo do lado esquerdo é incorporado implicitamente e o do lado direito explicitamente. Utilizando também a equação (3.3), obtém-se

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}\right) - \nabla \cdot (\eta_s + \eta_p) \nabla \mathbf{u} = -\nabla p - \nabla \cdot (\eta_p \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (3.6)$$

Os termos difusivos adicionados anulam-se quando é atingido o regime permanente. Esta técnica tem um efeito particularmente estabilizador para casos em que o tensor das tensões não inclui um solvente. De notar que na equação (3.6) foi ignorada a possível dependência da viscosidade e do tempo de relaxação na taxa de deformação, com o fim de facilitar a leitura, no entanto, essa relação de dependência pode existir.

#### 3.4.2 Conformação logarítmica do tensor das tensões

Uma das principais dificuldades em simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos é a instabilidade numérica existente em escoamentos de elevado número de Weissenberg. Sendo este tipo de escoamento o nosso alvo de estudo torna-se essencial a abordagem da técnica da conformação logarítmica [1, 22], elaborada precisamente para combater estas instabilidades e consequente divergência numérica.

O método da conformação logarítmica consiste numa mudança de variável quando se evolui o tensor polimérico em função do tempo, relacionando-o com o tensor de conformação ( $\mathbf{A}$ ). Nos modelos constitutivos utilizados neste estudo esta relação é apresentada pela equação (3.7),

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_p}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (3.7)$$

É definido um novo tensor ( $\boldsymbol{\Theta}$ ) como o logaritmo natural do tensor de conformação, que pode ser diagonalizado, uma vez que é uma matriz positiva definida

$$\boldsymbol{\Theta} = \ln(\mathbf{A}) = \mathbf{R} \ln(\boldsymbol{\Lambda}) \mathbf{R}^T \quad (3.8)$$

onde  $\mathbf{R}$  é uma matriz que contém os vetores próprios de  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{\Lambda}$  é uma matriz cujos elementos diagonais correspondem aos valores próprios que resultam da decomposição de  $\mathbf{A}$ . Reescrevendo a equação constitutiva (3.4) em ordem a  $\mathbf{\Theta}$  obtém-se

$$\frac{\partial \mathbf{\Theta}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{\Theta} = \mathbf{\Omega} \mathbf{\Theta} - \mathbf{\Theta} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} + \frac{1}{\lambda} \mathbf{g}(\mathbf{\Theta}) \quad (3.9)$$

em que  $\mathbf{g}(\mathbf{\Theta})$  representa uma função tensorial dependente de  $\mathbf{\Theta}$ , específica para cada modelo constitutivo (ver subcapítulo 3.5) e

$$\mathbf{B} = \mathbf{R} \begin{bmatrix} m_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz} \end{bmatrix} \mathbf{R}^T \quad (3.10)$$

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{R} \begin{bmatrix} 0 & \omega_{xy} & \omega_{xz} \\ -\omega_{xy} & 0 & \omega_{yz} \\ -\omega_{xz} & -\omega_{yz} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{R}^T \quad (3.11)$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{R} \nabla \mathbf{u}^T \mathbf{R}^T = \begin{bmatrix} m_{xx} & m_{xy} & m_{xz} \\ m_{yx} & m_{yy} & m_{yz} \\ m_{zx} & m_{zy} & m_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

$$\omega_{ij} = \frac{\Lambda_j m_{ij} + \Lambda_i m_{ji}}{\Lambda_j - \Lambda_i} \quad (3.13)$$

Depois de resolvida a equação (3.9)  $\mathbf{\Theta}$  pode ser diagonalizado da seguinte forma

$$\mathbf{\Theta} = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda}^\Theta \mathbf{R}^T \quad (3.14)$$

e invertendo os parâmetros da equação (3.8) é possível recuperar o tensor de conformação

$$\mathbf{A} = \exp(\mathbf{\Theta}) = \mathbf{R} \exp(\mathbf{\Lambda}^\Theta) \mathbf{R}^T \quad (3.15)$$

Para concluir, obtém-se o tensor extra polimérico a partir de  $\mathbf{A}$ , mais uma vez utilizando a relação apresentada na equação (3.7).

### 3.4.3 Algoritmo de acoplamento pressão-velocidade

Aplicando a equação da continuidade à variável da pressão e seguindo a metodologia SIMPLEC [1, 22] obtém-se, de uma forma simplificada,

$$\nabla \cdot \left( \frac{1}{a_P - H_1} (\nabla p)_P \right) = \nabla \cdot \left[ \frac{\mathbf{H}}{a_P} + \left( \frac{1}{a_P - H_1} - \frac{1}{a_P} \right) (\nabla p^*)_P \right] \quad (3.16)$$

em que  $a_P$  representa os coeficientes diagonais da equação de quantidade de movimento,  $H_1$  representa o valor simétrico da soma dos coeficientes não-diagonais da equação de quantidade de movimento (3.17),  $\mathbf{H}$  representa as contribuições não-diagonais da equação de movimento (3.18), mais termos fonte e  $p^*$  representa o campo de pressões calculado na iteração, ou passo temporal, anterior.

$$H_1 = - \sum_{nb} a_{nb} \quad (3.17)$$

$$\mathbf{H} = - \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb}^* + \mathbf{b} \quad (3.18)$$

Uma vez obtido o campo de pressões congruente com a equação de continuidade (Eq. 3.16) procede-se à correção da velocidade através da equação correspondente

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{H}}{a_P} + \left( \frac{1}{a_P - H_1} - \frac{1}{a_P} \right) (\nabla p^*)_P - \frac{1}{a_P - H_1} (\nabla p)_P \quad (3.19)$$

#### 3.4.4 Algoritmo de acoplamento tensão-velocidade

Em Pimenta e Alves [1, 22] foi formulada a equação (3.20) para discretização do divergente das tensões poliméricas extra  $(\nabla \cdot \boldsymbol{\tau})$ , provando ser bastante estável.

$$\boldsymbol{\tau}_f = \bar{\boldsymbol{\tau}}_f + \eta_p \left[ (\nabla \mathbf{u}|_f + (\nabla \mathbf{u})^T|_f) - \left( \overline{\nabla \mathbf{u}}|_f + \overline{(\nabla \mathbf{u})^T}|_f \right) \right] \quad (3.20)$$

Na equação (3.20) os termos com barra superior são obtidos por interpolação linear dos valores nos centros das células, enquanto que o outro gradiente de velocidade é avaliado diretamente a partir das velocidades no centro das faces. Introduzindo  $\boldsymbol{\tau}_f$ , como definido na formulação anterior, na equação de quantidade de movimento, com os termos da difusão nos dois lados já inseridos, o resultado é

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot (\eta_s + \eta_p) \nabla \mathbf{u} = -\nabla p - \overline{\nabla \cdot \eta_p \nabla \mathbf{u}} + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{f} \quad (3.21)$$

Aqui, o termo  $\overline{\nabla \cdot \eta_p \nabla \mathbf{u}}$  é uma "derivada especial de segunda ordem" e representa o divergente do gradiente de velocidade, sendo que o gradiente de velocidade nas faces resulta de interpolação linear do gradiente calculado nos centros das células. A literatura [1] também demonstra que refinando a malha, a equação (3.20) tende para  $\boldsymbol{\tau}_f = \bar{\boldsymbol{\tau}}_f$  e os parâmetros adicionados anulam-se. De salientar que na equação (3.21) foram ignorados os gradientes de velocidade transpostos, isto apenas para simplificar a escrita, uma vez que a continuidade determina que  $\nabla \cdot \nabla \mathbf{u}^T = 0$

#### 3.4.5 Esquemas de alta resolução

Os termos convectivos da metodologia dos volumes finitos, apresentam-se na forma discretizada da seguinte forma

$$\int_V (\mathbf{u} \cdot \nabla \phi) dV = \sum_f \phi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) = \sum_f \phi_f F_f \quad (3.22)$$

onde  $\phi$  é a variável que é transportada,  $\mathbf{S}_f$  é o vector área da face e  $F_f$  é o caudal volumétrico que atravessa a face  $f$ . Através da interpolação apresentada na equação (3.19) foram já obtidos os valores dos caudais nas faces, no entanto, há que recorrer a outra interpolação para calcular  $\phi$  nos centros das faces, a partir dos valores

já conhecidos nos centros das células. No programa OpenFOAM estão disponíveis inúmeros esquemas para resolver este cálculo, mas são os esquemas de alta-resolução (*High-Resolution Schemes*) os escolhidos por Pimenta e Alves [1, 22] para serem aplicados na ferramenta rheoTool e, consequentemente, neste estudo. Nos métodos HRS é utilizada a abordagem do fator de peso normalizado (*Normalized Weighting Factor*) utilizando grandezas adimensionais definidas como

$$\tilde{\phi}_f = \alpha \tilde{\phi}_C + \beta \quad (3.23)$$

e com as seguintes relações

$$\tilde{\phi}_f = \frac{\phi_f - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (3.24)$$

$$\tilde{\phi}_C = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (3.25)$$

Para melhor entendimento dos índices nas equações (3.23 - 3.25) a norma é: para qualquer face  $f$ , a célula C representa a célula de onde vem o escoamento, ou seja, a montante da face  $f$ , a célula D é a jusante da face  $f$  e a célula U é a célula a montante da célula C. Habitualmente, a célula U não deve ser identificada como independente e  $\phi_U$  pode ser definido como [1, 22]

$$\phi_U = \phi_D - 2(\nabla\phi)_C \cdot \mathbf{d}_{CD} \quad (3.26)$$

em que  $\mathbf{d}_{CD}$  é o vetor que une a célula C à célula D.

Os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  na equação (3.23) são específicos para cada esquema de alta-resolução, podendo ser funções de  $\tilde{\phi}_C$ . Uma vez que o esquema utilizado neste estudo é o CUBISTA [1, 22] estes escalares tomam os seguintes valores:

$$[\alpha, \beta] = \begin{cases} [1, 0] & \tilde{\phi}_C \leq 0 \vee \tilde{\phi}_C \geq 1 \\ [7/4, 0] & 0 < \tilde{\phi}_C < 3/8 \\ [3/4, 3/8] & 3/8 \leq \tilde{\phi}_C \leq 3/4 \\ [1/4, 3/4] & 3/4 < \tilde{\phi}_C < 1 \end{cases}$$

A contribuição de montante (*upwind*) do HRS é discretizada implicitamente enquanto que a restante é discretizada explicitamente [1], que juntando às equações (3.23 - 3.26) resulta em

$$\phi_f = [\phi_C]_{\text{implicit}} + [(\alpha - 1)\phi_C + \beta\phi_D + (1 - \alpha - \beta)(\phi_D - 2(\nabla\phi)_C \cdot \mathbf{d}_{CD})]_{\text{explicit}} \quad (3.27)$$

### 3.5 Modelos constitutivos

Maxwell [12] acreditava que os gases tinham um comportamento viscoelástico e foi a primeira pessoa a desenvolver um modelo constitutivo que combinava os efeitos viscosos e elásticos num fluido. O seu modelo simplificado viola algumas regras de invariância, que limitam a sua aplicação a alguns tipos de escoamento, mas está na base de variantes mais gerais que eliminam essas limitações.



### 3.5.1 Modelo convectivo superior de Maxwell (UCM) e modelo Oldroyd-B

Se a função  $f(\boldsymbol{\tau})$  na equação (3.4) for unitária essa relação descreve o modelo UCM, que pode ser utilizado para representar o comportamento simplificado de um polímero fundido.

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_P (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (3.28)$$

Ao aplicar a conformação logarítmica (subcapítulo 3.4.2) a equação constitutiva toma a seguinte forma

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Theta}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Theta} - \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Omega}) + 2\mathbf{B} + \frac{1}{\lambda} (e^{-\boldsymbol{\Theta}} - \mathbf{I}) \quad (3.29)$$

Se adicionarmos ao tensor  $\boldsymbol{\tau}$  a contribuição de um solvente newtoniano,  $\boldsymbol{\tau}_s$  (3.3), obtemos o modelo Oldroyd-B. Neste modelo é comum referir um parâmetro,  $\beta$ , que representa a razão de viscosidades do fluido, definida como

$$\beta = \frac{\eta_S}{\eta_S + \eta_P} \quad (3.30)$$

Apesar das limitações destes modelos, nomeadamente a incapacidade de prever a variação da viscosidade no escoamento e a não imposição de limite de extensão molecular, estes modelos são capazes de captar qualitativamente algumas das características dos escoamentos com elasticidade.

### 3.5.2 Modelo Phan-Thien Tanner simplificado (sPTT)

A versão simplificada do modelo desenvolvido por Phan-Thien e Tanner [16] acrescenta ao modelo Oldroyd-B o parâmetro  $\varepsilon$ , que representa o limite de extensão das moléculas. A equação constitutiva deste modelo é a seguinte

$$\left[1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta_P} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\right] \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_P (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (3.31)$$

e também aplicando aqui a conformação logarítmica, obtém-se

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Theta}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Theta} - \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Omega}) + 2\mathbf{B} + \frac{1}{\lambda} \left\{1 + \varepsilon [\text{tr}(e^{\boldsymbol{\Theta}}) - 3]\right\} (e^{-\boldsymbol{\Theta}} - \mathbf{I}) \quad (3.32)$$

De notar que, para  $\varepsilon = 0$  estamos novamente perante o modelo Oldroyd-B e quando  $\varepsilon = 0$  e  $\beta = 0$  o modelo UCM é recuperado.

## 3.6 Tipo de escoamento (*flowType*)

Também neste estudo foi utilizada a ferramenta *flowType* (Lee et al. 2007) do OpenFOAM, que permite classificar o tipo de escoamento através dos campos de velocidades calculados numa simulação. O parâmetro escalar utilizado para classificar o tipo de escoamento é

$$\xi = \frac{|\mathbf{D}| - |\boldsymbol{\Omega}|}{|\mathbf{D}| + |\boldsymbol{\Omega}|} \quad (3.33)$$

onde  $|\mathbf{D}|$  e  $|\mathbf{\Omega}|$  são as determinantes dos tensores da taxa de deformação e da vorticidade, respetivamente,

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.34)$$

$$\mathbf{\Omega} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.35)$$

O escoamento é então classificado conforme o escalar calculado, sendo que para  $\xi = 1$  o escoamento é considerado puramente extensional, para  $\xi = 0$  o escoamento é de corte e para  $\xi = -1$  ocorre rotação de corpo sólido, região do escoamento em que os elementos do fluido são escoados juntos como um sólido.

## Capítulo 4

# Descrição do software

As simulações numéricas neste estudo foram efetuadas recorrendo ao OpenFOAM, o software de código aberto mais popular de mecânica de fluidos computacional nas áreas da engenharia e da ciência. Esta ferramenta baseia-se no método do volumes finitos e consiste num conjunto de bibliotecas em C++, com vários *solvers* que resolvem equações para tipos específicos de escoamento, bem como alguns utilitários, que permitem, por exemplo, a criação de malhas e pós-processamento de dados.

O *solver* utilizado neste estudo é o *rheoFoam*, disponível na ferramenta *rheoTool* desenvolvida por Pimenta e Alves [1]. Esta ferramenta, destinada ao estudo numérico de fluidos viscoelásticos, baseia-se no *viscoelasticFluidFoam*, um *solver* já existente no OpenFoam ao qual foram aplicadas certas técnicas de estabilização numérica, permitindo, por exemplo, realizar simulações de escoamentos com elevado número de Weissenberg.

Neste capítulo são demonstradas as características principais do software OpenFOAM, bem como os passos necessários para correr uma simulação para este estudo. São também apresentadas as definições adicionais introduzidas com a ferramenta *rheoTool*, como é esclarecido por Pimenta e Alves [1] no manual disponibilizado [22].

### 4.1 Organização de pastas

Os dados de qualquer caso de estudo do OpenFOAM estão contidos num diretório (figura 4.1), através de uma série de ficheiros organizados em três tipos de sub-diretórios:

- *constant*, que contém um sub-diretório denominado *polyMesh* onde é definida a malha que se pretende gerar e também contém a informação da malha após ser gerada. Aqui também se encontra o dicionário *constitutiveProperties*, exclusivo da aplicação *rheoTool*, onde estão presentes os parâmetros fixos da simulação, como propriedades físicas e informação alusiva aos modelos constitutivos. Um exemplo deste ficheiro é apresentado no apêndice A.

- *system*, onde se encontram os ficheiros de controlo da simulação e do método numérico. Os principais dicionários neste diretório são o *controlDict*, que permite controlar definições como o passo temporal, o tempo de simulação e o limite de

número de Courant, o *fvSchemes* contendo os métodos de discretização das equações diferenciais e o *fvSolutions*, onde são definidos os *solvers* das equações.

-*time directories*, ou diretórios de tempo. É nestas pastas que se encontram registados os campos de cada variável calculados para cada instante de tempo. Antes de correr a simulação existe apenas o diretório de tempo relativo ao instante inicial, denominado de  $0$ , onde são definidas, pelo utilizador, as condições iniciais do escoamento. Como referido no capítulo 3, a ferramenta *rheoTool* utiliza a abordagem da conformação logarítmica, pelo que há que considerar um novo campo, *theta*, representativo do logaritmo natural do tensor de conformação ( $\Theta$ ), além dos campos típicos já existentes no *solver* original do OpenFOAM, sejam eles *p*, *U* e *tau* relativos à pressão, velocidade e tensão, respetivamente. São também calculados os vetores próprios, *eigVecs* (representados por  $\mathbf{R}$ ) e os valores próprios, *eigVals* (representados por  $\mathbf{\Lambda}$ ), que resultam da diagonalização do tensor de conformação. Apesar de não ser necessário definir estes últimos dois campos no instante inicial, eles serão lidos, se estiverem presentes.

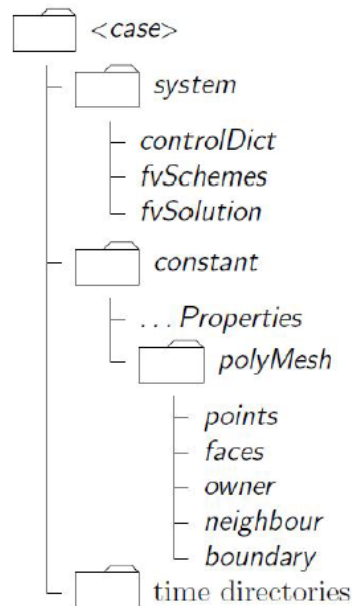


Figura 4.1: Estrutura do diretório de um caso em OpenFOAM (figura retirada do manual [23]).

## 4.2 Pré-processamento

### 4.2.1 Criação da malha

Como já esclarecido no capítulo 3 as simulações numéricas realizadas em OpenFOAM são baseadas no método dos volumes finitos, pelo que é necessário representar o domínio físico em estudo na forma de uma malha bem definida.

A definição geométrica da malha encontra-se no ficheiro *blockMeshDict* do subdiretório *polyMesh*, onde o utilizador pode criar uma malha de raiz, ou alterar

uma malha já criada para outro caso de estudo. Para criar uma malha são primeiro definidos todos os vértices da geometria através de coordenadas cartesianas, seguido da criação dos blocos. Os blocos são geometrias hexaédricas, contendo oito vértices, que são divididos em várias células à descrição do utilizador. De notar que, quanto maior o número de células imposto, mais refinada se torna a malha, o que significa mais tempo necessário para concluir uma simulação, mas, em simultâneo, o seu resultado terá maior precisão. Também é possível adicionar um gradiente de expansão a um bloco, aumentando assim o tamanho das células, relativamente à anterior, numa dada direção. Isto pode ser vantajoso para zonas do domínio físico onde as propriedades do fluido não são consideradas importantes para o caso de estudo, ou seja, aumentando o espaçamento das células nessas zonas implica um menor número de células utilizado e, conseqüentemente, menos tempo requerido para correr uma simulação, mas também menor precisão no resultado. As arestas dos blocos são, por definição, retas, apesar de ser possível também definir curvas se necessário.

### 4.2.2 Condições de fronteira

Ainda no ficheiro *blockMeshDict* é possível dividir as fronteiras da geometria em várias regiões, ou *patches*, às quais é associado um rótulo que define o tipo de condição de fronteira dessa região com o exterior fictício.

Utilizando estes rótulos torna-se possível definir, para cada *patch*, as condições de fronteira e os campos iniciais, no diretório de tempo do instante inicial, fechando assim o sistema de equações que governa o escoamento. Os principais tipos de condições de fronteira utilizadas neste estudo são *fixedValue*, que impõe um valor fixo sobre a superfície do *patch* para todos os instantes da simulação (condição de Dirichlet), *extST*, para extrapolação das tensões, e *zeroGradient*, que impõe um gradiente nulo ao campo em toda a superfície do *patch* (condição de Neumann).

### 4.2.3 Equações discretizadas e solução

No capítulo 3 é esclarecido que os escoamentos regem-se por uma série de equações diferenciais parciais.

Uma vez que estas equações dependem de dimensões espaciais e do tempo, de carácter contínuo, para serem resolvidas em dinâmica dos fluidos computacional é necessário substituí-las por aproximações discretas. Através deste processo, a discretização, as variáveis tornam-se conhecidas para instantes de tempo específicos só nalgumas posições espaciais, o que se traduz num certo erro. O método numérico aplicado deve conseguir reduzir esse erro para valores aceitáveis, embora isto também dependa do grau de refinamento da malha no espaço e no tempo, para além da ordem dos métodos de discretização.

No ficheiro *fvSchemes* do subdiretório *system* especificam-se os métodos de discretização dos volumes finitos utilizados para resolver as derivadas e também os esquemas de interpolação centro-face. Neste subdiretório encontra-se também o ficheiro *fvSolutions* onde são definidas as soluções, *solvers*, das equações algébricas. O conteúdo destes ficheiros é apresentado também no apêndice A.

#### 4.2.4 Controlo da simulação

O último passo antes de correr uma simulação em OpenFOAM é definir os parâmetros de execução do *solver*, nomeadamente, os instantes inicial e final da simulação, o passo temporal entre cálculos e o intervalo de tempo em que são registados os campos existentes e a sua precisão. Todas estas definições podem ser alteradas pelo utilizador no dicionário *controlDict* do subdiretório *system*. Também o atributo *coded functionObjects* pode ser definido neste ficheiro, permitindo extrair valores de variáveis de interesse, para cada passo temporal, enquanto decorre a simulação.

Para que se atinja estabilidade numérica e para que os campos de variáveis converjam para valores aceitáveis é necessário impor um parâmetro em cada célula, o número de Courant, que relaciona o passo temporal,  $\delta t$ , com a magnitude da velocidade da célula,  $|\mathbf{u}|$ , e com o tamanho da célula na direção da velocidade,  $\delta x$ , da seguinte forma

$$Co = \frac{\delta t |\mathbf{u}|}{\delta x} \quad (4.1)$$

De modo a haver estabilidade e boa convergência da solução, é imposto um valor máximo para o número de Courant de 1, para toda a malha. É uma prática comum determinar o valor máximo de  $\delta t$  para o pior caso possível, ou seja, a célula de menores dimensões onde o efeito da velocidade é superior, garantindo assim  $Co < 1$  em todo o domínio. Também é possível realizar simulações com um passo temporal ajustável, sendo um novo  $\delta t$  calculado a cada instante, tendo em conta um valor máximo do número de Courant, definido pelo utilizador.

### 4.3 Iniciar uma simulação

Finalizado o pré-processamento o utilizador pode correr a simulação inserindo o nome do *solver* (*rheoFoam*, no presente caso de estudo) na janela de comandos. Uma simulação em OpenFOAM poderá correr de duas maneiras: em primeiro plano, onde todo o progresso da simulação é apresentado na janela de comandos; em segundo plano, podendo a informação da simulação ser guardada num ficheiro, mantendo assim o terminal livre para realizar outras tarefas.

### 4.4 Pós-processamento

Incluída na instalação do software OpenFOAM, a aplicação gráfica ParaView dispõe de várias ferramentas que permitem interagir com a malha de estudo em 3D e observar os campos de cada variável em qualquer instante de tempo associado a um diretório de tempo gravado durante a simulação.

### 4.5 Considerações finais

Torna-se bastante claro que a complexidade das equações e iterações envolvidas no presente caso de estudo, implica a necessidade de utilização de um computador com elevada capacidade de processamento, de modo a realizar as simulações num espaço

de tempo viável para a realização deste estudo.

Foi disponibilizado então, pela FEUP, acesso aos recursos de *High Performance Computing* (HPC), que consistem num conjunto organizado de *clusters* de máquinas com tecnologia semelhante à encontrada num computador convencional, mas com processadores (CPU's) mais poderosos, mais memória RAM e uma rede muito mais rápida que qualquer uma de nível de consumidor.

O *cluster* em questão foi o *Avalanche*, o mais recentemente adquirido pela FEUP, composto por 29 nós, tendo cada nó 16 processadores, 64 a 128 GB de memória RAM e uma ligação de rede InfiniBand de 40 Gbps. O armazenamento central é de 10 TB tendo cada nó 500 GB de armazenamento local. O sistema operativo utilizado é o Scientific Linux, versão 6.





## Capítulo 5

# Verificação do método numérico

O caso de estudo presente envolve uma geometria *cross-slot* com quatro canais ortogonais, com duas entradas de escoamento (Norte e Oeste) e duas saídas (Este e Sul) como pode ser observado na figura 5.1. Como já referido no capítulo 2 esta configuração de entradas é diferente de qualquer outra existente na literatura para escoamentos de fluidos viscoelásticos, sendo que a mais típica seria duas entradas colineares (Este e Oeste) e duas saídas colineares (Norte e Sul).

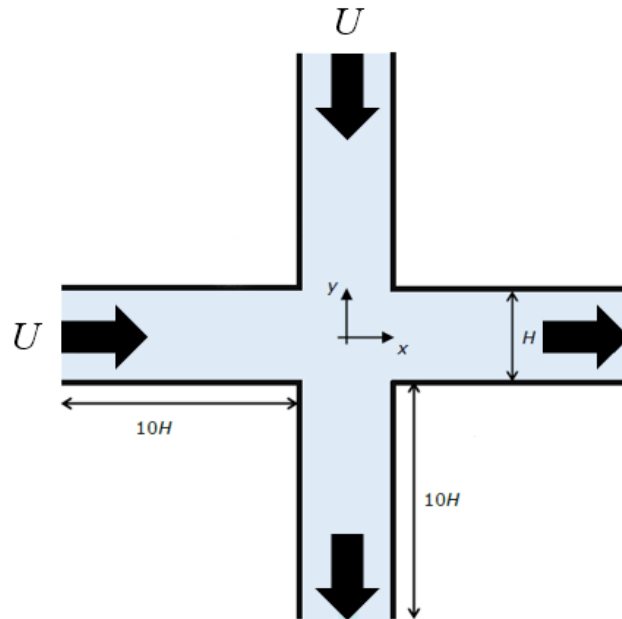


Figura 5.1: Representação esquemática da micro-geometria *cross-slot*, onde  $U$  é a velocidade média imposta nas entradas e  $H$  é a largura característica dos canais.

Nos escoamentos aqui estudados é imposto aos fluidos uma velocidade média ( $U$ ) de 1 m/s, uma massa volumétrica ( $\rho$ ) de 1 kg/m<sup>3</sup> e as viscosidades polimérica ( $\eta_P$ ) e do solvente ( $\eta_S$ ) são variadas conforme o modelo utilizado, de modo a definir

valores fixos para  $\beta$ , sendo que a viscosidade total é  $\eta = \eta_P + \eta_S$ . Apesar de  $Re \neq 0$ , é possível reproduzir este escoamento numericamente, ignorando o termo inercial da equação da quantidade de movimento, como é demonstrado no ficheiro *fvSchemes* no apêndice A. Assim é garantido que os escoamentos são apenas caracterizados por efeitos elásticos e viscosos.

As propriedades físicas usadas não são realistas, mas escolheram-se esses valores para simplificar os cálculos, uma vez que os resultados serão sempre apresentados na forma adimensional.

Dos modelos constitutivos para fluidos viscoelásticos utilizados, pode-se afirmar que o modelo UCM é o que implica maior dificuldade de simulação numérica e é, por isso, normalmente limitado para escoamentos com baixas taxas de deformação. Isto deve-se ao facto do modelo não limitar a extensão das moléculas, podendo as tensões tornar-se infinitas. Sendo o modelo UCM de maior dificuldade de simulação numérica é seguro assumir que, escolhendo uma malha bem refinada para este modelo, esta será também adequada para os modelos Oldroyd-B e sPTT.

Para definir o domínio geométrico foi utilizada uma malha já existente, disponibilizada nos tutoriais do *rheoTool*, com as alterações necessárias efetuadas para se adequar a este caso de estudo. É apresentada na figura 5.2 uma ilustração da malha em questão, a largura dos canais tem o valor característico  $H$  e o comprimento dos canais de entrada e saída do escoamento é de  $10H$ . O quadrado central é composto de  $51 \times 51$  células uniformes com um espaçamento mínimo de  $\Delta x_{min} = \Delta y_{min} = 0.019608H \simeq 0.02H$  e cada canal tem 60 células ao longo do seu comprimento cujo espaçamento aumenta com o afastamento da região central da malha, perfazendo um total de 14841 células. A literatura [4] demonstra que diminuir assim o refinamento da malha ao longo dos canais tem um efeito desprezável no cálculo do  $Wi$  crítico e no padrão do escoamento, além de que o estudo consiste na análise da zona central da geometria onde o escoamento é, de facto, concentrado.

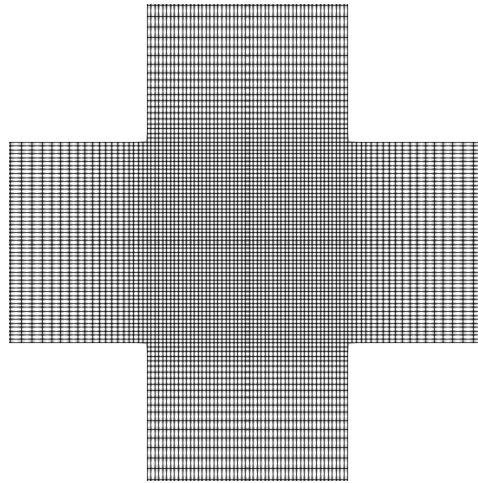


Figura 5.2: Malha representativa do domínio físico do caso de estudo (M51).

De modo a validar a malha escolhida para este estudo foi necessário determinar o erro associado à sua implementação em simulações numéricas. Para tal, foi utilizado o método de extrapolação de Richardson [11], que permite obter o valor da variável pretendida ( $\phi$ ) mais próximo da realidade, através de um conjunto de malhas com diferentes graus de refinamento. Foi determinado então o valor crítico de  $Wi$  para três malhas diferentes e, após obtido  $\phi$  por extrapolação, foi possível calcular o erro associado a cada uma das malhas.

A ordem de convergência e o valor extrapolado podem ser calculados através das seguintes equações, de acordo com Ferziger e Perić [24]:

$$p_c = \frac{\log(\frac{\phi_{2h} - \phi_{4h}}{\phi_h - \phi_{2h}})}{\log 2} \quad (5.1)$$

$$\phi_{extrapolado} = \phi_h + \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^{p_c} - 1} \quad (5.2)$$

onde  $4h$  diz respeito à malha menos refinada e  $h$  à mais refinada. O valor extrapolado foi calculado para  $p_c = 2$  por ser próximo da ordem esperada pelos métodos usados pelo *rheoFoam*. Os resultados das três malhas estão apresentados na tabela 5.1, inclusive o erro relativo, em que M51 define a malha descrita anteriormente, escolhida para a realização do presente estudo numérico.

Tabela 5.1: Dados relativos à validação da malha deste estudo

Malha	$\Delta x_{min}$	$Wi_{crit}$	$\varepsilon_r(\%)$
M25	1/25	1.55	19.14
M51	1/51	1.26	0.53
M101	1/101	1.255	0.13
	$\phi$	1.2533	

Aqui observa-se que o número de Weissenberg crítico tende a diminuir com o refinamento da malha e que o erro associado à malha escolhida para este estudo numérico (M51) é desprezável ( $\approx 0,5\%$ ), pelo que é seguro afirmar que as simulações reproduzirão resultados de alta precisão.

Também na figura 5.3 é possível observar a evolução do valor crítico de  $Wi$  em função do comprimento mínimo das células de cada malha.

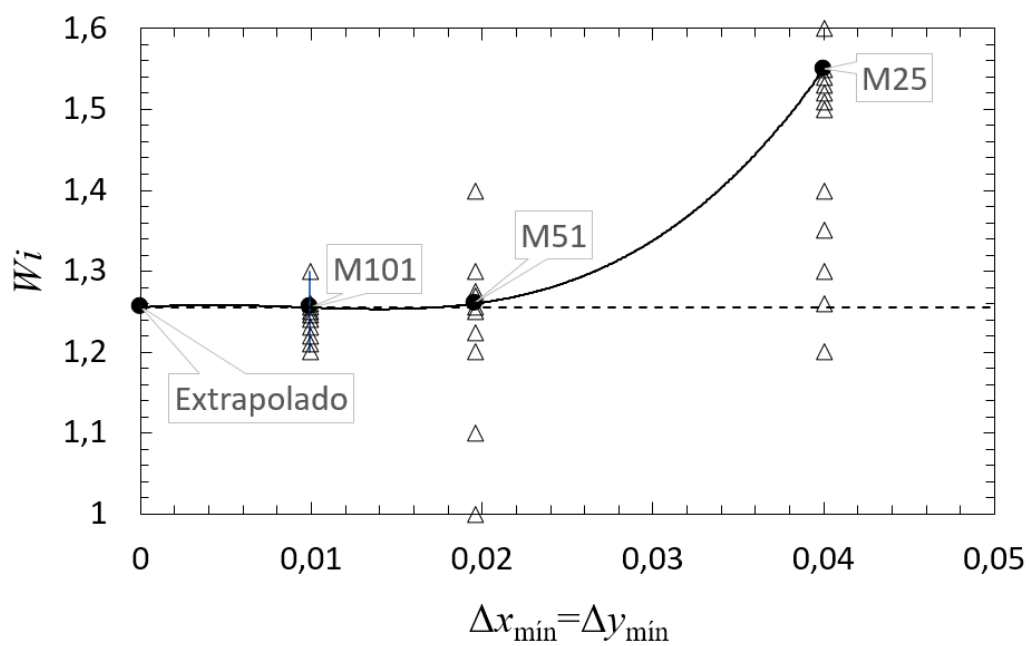


Figura 5.3: Variação do  $Wi$  crítico em função do tamanho mínimo das células de cada malha usada e outras simulações realizadas.

## Capítulo 6

# Resultados

### 6.1 Diagramas de estabilidade

Os gráficos seguintes ilustram as simulações efetuadas, para diferentes valores de elasticidade ( $Wi$ ) e modelos constitutivos. Uma vez que não foi detetada nenhuma transição para escoamento assimétrico estacionário em nenhum dos casos estudados neste trabalho, o número de Weissenberg tomado como crítico é o valor a partir do qual o escoamento torna-se dependente do tempo, oscilando quase periodicamente.

Na figura 6.1 é apresentado o diagrama de estabilidade para os modelos em que não é considerado o limite de extensão das moléculas ( $\varepsilon = 0$ ), ou seja, UCM e Oldroyd-B. A adição do solvente Newtoniano traduz-se em valores críticos de  $Wi$  mais elevados, especialmente acima de  $\beta = 0.5$ .

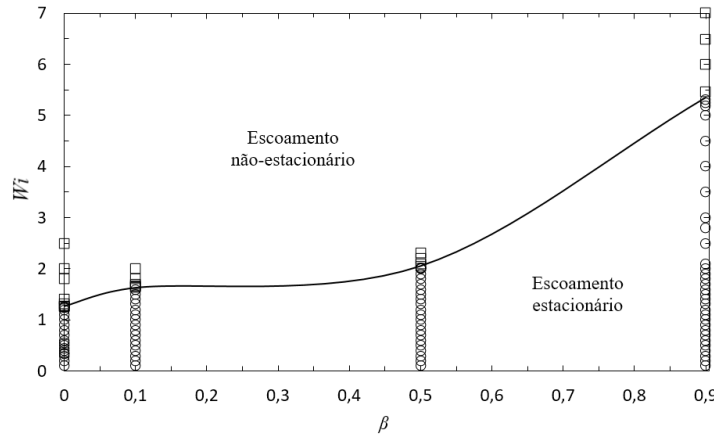


Figura 6.1: Diagrama de estabilidade dos modelos constitutivos UCM ( $\beta = 0$ ) e Oldroyd-B ( $\beta = 0.1, 0.5$  e  $0.9$ ).

É de notar que os valores de  $Wi$  a partir do qual o escoamento se torna instável são bastante mais elevados que os valores da literatura [4, 6] para o escoamento clássico no *cross-slot*. Ao analisar os resultados em que foi utilizado o modelo sPTT, concluiu-se que os valores de  $Wi$  crítico tornam-se de tal forma elevados que chegam a não permitir realizar simulações de forma realista. Mais especificamente,

para casos em que o  $Wi$  crítico ultrapassa o valor de 100, o tempo de simulação necessário, para garantir que o escoamento atinge o equilíbrio, seria de pelo menos 10000 segundos, o que exigiria uma capacidade computacional bastante superior à disponibilizada. Por este motivo não foi possível, devido ao prazo estabelecido para finalizar este estudo, encontrar o valor crítico de  $Wi$  para todos os casos analisados.

Ainda que incompletos, os diagramas de estabilidade do modelo sPTT estão apresentados nas figuras 6.2 e 6.3, para  $\varepsilon = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.25$ , respetivamente.

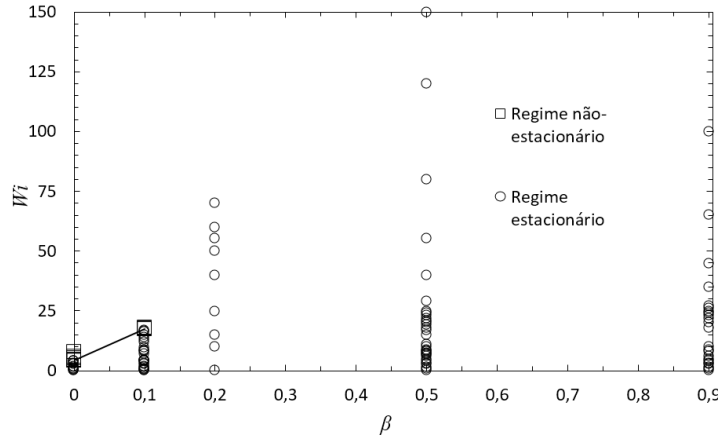


Figura 6.2: Diagrama de estabilidade do modelo constitutivo sPTT, com  $\varepsilon = 0.02$ .

Como no caso anterior, o aumento de  $\beta$  faz crescer o valor crítico do número de Weissenberg, mas de forma bastante mais pronunciada e este toma também valores muito mais elevados. No caso da figura 6.2, a partir de um certo valor de  $\beta$  ( $\approx 0.2$ ), torna-se bastante difícil de identificar o  $Wi$  crítico. Aumentar o parâmetro  $\varepsilon$  afeta bastante o  $Wi$  crítico, ao ponto de, no caso da figura 6.3 já não ser possível identificá-lo na gama estudada.

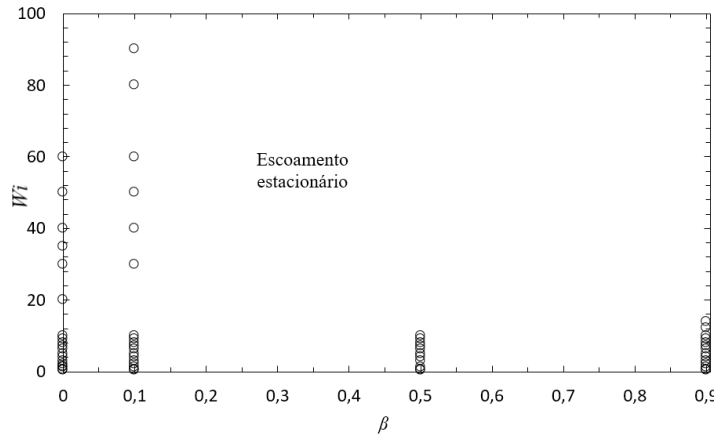


Figura 6.3: Diagrama de estabilidade do modelo constitutivo sPTT, com  $\varepsilon = 0.25$ .

A tabela 6.1 indica os valores críticos de  $Wi$  identificados para cada modelo.

Tabela 6.1: Valores de  $Wi$  crítico obtidos para diferentes modelos constitutivos

$\varepsilon = 0$ (Oldroyd-B)				$\varepsilon = 0.02$ (sPTT)		
$\beta = 0$ (UCM)	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.5$	$\beta = 0.9$	$\beta = 0$	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.2$
1.26	1.625	2.05	5.35	4.3	17.5	—

## 6.2 Regime estacionário

Nesta secção é demonstrado como variam os campos de velocidade, tensões e tipo de escoamento com o aumento de  $Wi$ , para diferentes modelos constitutivos. Todas as variáveis analisadas nesta secção foram apresentadas na sua forma adimensional.

As figuras representativas destes resultados foram obtidas através do utilitário *paraView*, como já referido no capítulo 4 e todos os campos seguidamente apresentados são relativos ao instante final de cada simulação, que varia com o tempo de relaxação do fluido ( $\approx 100\lambda$ ). Uma vez que interessa avaliar as alterações na zona da bifurcação, todas as figuras apresentadas foram concentradas nessa zona, de modo a facilitar a sua compreensão.

Um dos principais objetivos é investigar a possível existência de um valor de  $Wi$  crítico a partir do qual o escoamento muda de estacionário simétrico para estacionário assimétrico, como previsto na literatura para o *cross-slot* padrão [3, 4, 6, 5, 19, 7, 8, 9]. Independentemente de isto se verificar ou não, é também pretendido continuar a avaliar os escoamentos em cada modelo para números de Weissenberg crescentes até se atingir um outro valor crítico, a partir do qual o escoamento se torna instável e dependente do tempo.

### 6.2.1 Modelo UCM

O primeiro modelo a ser apresentado é o matematicamente mais simples, mas numericamente mais complexo. Serão analisados e comparados os mapas de velocidade, tensão e tipo de escoamento (*flowtype*) para diferentes valores de  $Wi$ . Sendo o primeiro modelo a ser simulado, é possível afirmar desde já que os efeitos do aumento de  $Wi$  e se encontram bem presentes no escoamento, principalmente observando os resultados para a velocidade e tensão de corte.

#### 6.2.1.1 Velocidade

Analisando a figura 6.4 podemos comparar os mapas da magnitude da velocidade adimensional ( $\|\mathbf{u}\|$ ) de 4 fluidos UCM com diferentes valores de  $Wi$ , sendo que o último corresponde ao escoamento cujo valor de  $Wi$  é crítico.

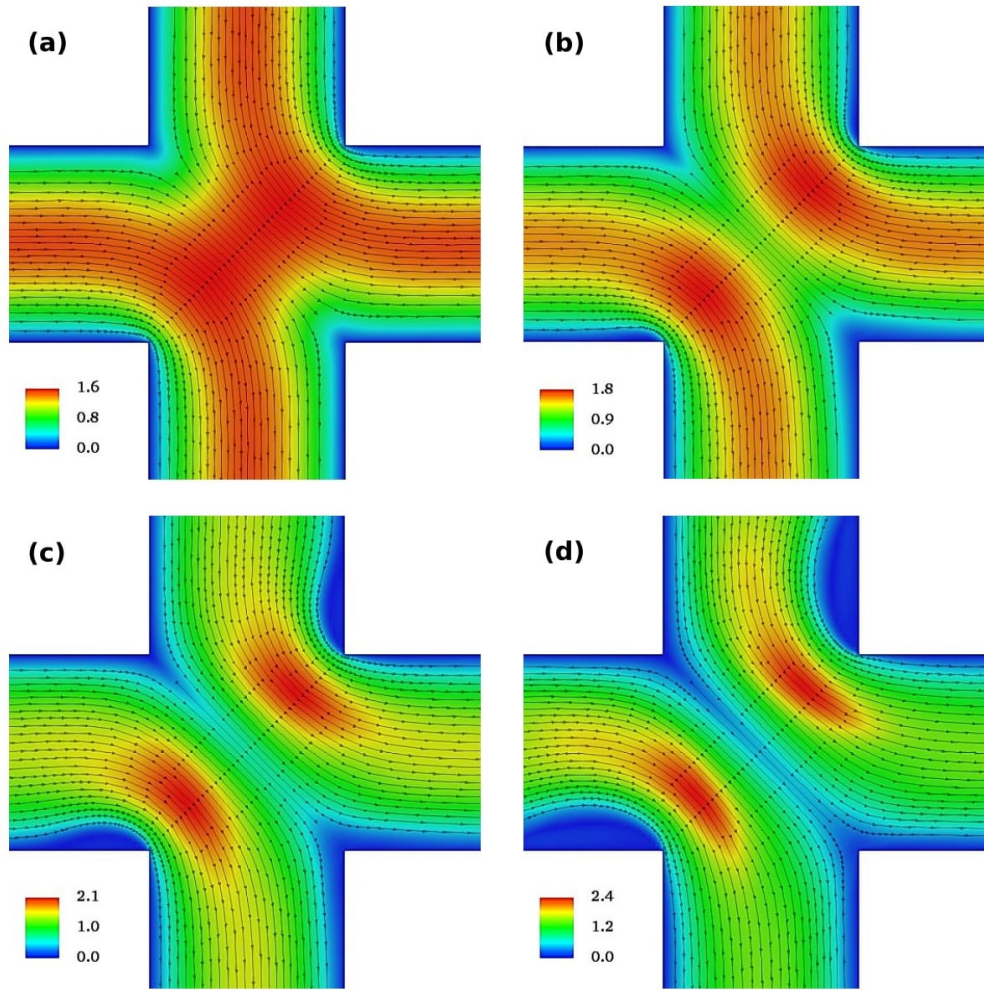


Figura 6.4: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.4$ , (c)  $Wi=0.8$  e (d)  $Wi=1.26$  (crítico).

O aumento de  $Wi$  traduz-se claramente num aumento da velocidade máxima do escoamento, apesar das regiões onde é verificada esta magnitude se tornarem progressivamente mais concentradas.

É de notar também uma aparente separação dos escoamentos no centro da bifurcação, onde a magnitude da velocidade toma valores próximos de zero. Este fenómeno também intensifica com o aumento de  $Wi$ . Para valores mais elevados do número de Weissenberg observam-se recirculações cada vez mais pronunciadas, junto às paredes dos braços de entrada do escoamento, a montante dos vértices superior direito e inferior esquerdo.

De notar que para este modelo foi apenas identificado um valor crítico, em que o escoamento passa de simétrico estacionário diretamente para não-estacionário. Por outras palavras, a assimetria estacionária descrita na literatura, para o *cross-slot* padrão, não se estabelece neste caso de estudo. No entanto, é possível observar outro efeito em que a convergência dos escoamentos aparenta recuar do centro para as entradas da bifurcação com o aumento da elasticidade.



### 6.2.1.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

Como já mencionado na secção 3.6, o OpenFOAM disponibiliza a ferramenta *flowType* que, através dos resultados da velocidade de um caso de estudo, calcula o parâmetro  $\xi$  representativo do tipo de escoamento. Para analisar os mapas de  $\xi$  há que considerar que, para  $\xi = 1$ , correspondente à cor vermelha, o escoamento é considerado extensional, para  $\xi = 0$  (verde) o escoamento é puramente de corte e  $\xi = -1$  (azul) corresponde a rotação de corpo sólido.

Fazendo uma análise global à figura 6.5 pode-se afirmar que os escoamentos são maioritariamente de corte (*shear*), excepto nas imediações da zona de bifurcação, onde existem também algumas regiões de escoamento extensional e rotação de corpo sólido.

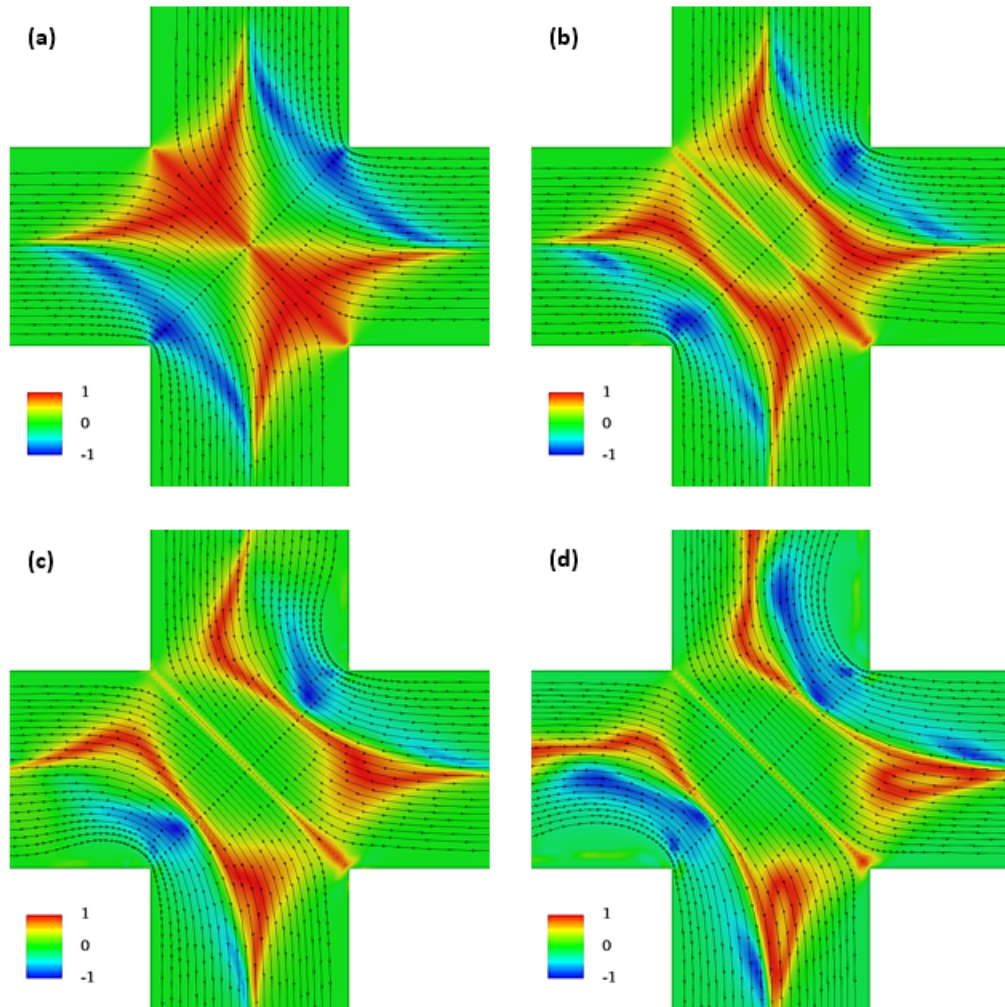


Figura 6.5: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.4$ , (c)  $Wi=0.8$  e (d)  $Wi=1.26$  (crítico).

No primeiro caso, de elasticidade mais reduzida ( $Wi = 0.1$ ), enquanto que parte do fluido na entrada da bifurcação escoava uniformemente em torno dos vértices superior direito e inferior esquerdo, outra aparenta ser ligeiramente comprimida na direção do centro da bifurcação e de seguida esticada simetricamente, na direção do centro dos escoamentos de saída. Com o aumento de  $Wi$  há uma perda de uniformidade neste perfil, apesar de ainda haver simetria entre os dois escoamentos.

Observa-se também que os efeitos extensionais ficam cada vez mais concentrados próximo do centro de cada corrente e o surgimento de uma zona no centro da bifurcação, dominada por escoamento de corte, excepto na região de separação dos escoamentos, onde se observa uma linha de escoamento onde as partículas são comprimidas na direção do ponto de estagnação (vértice inferior direito).

Como esperado, o escoamento no presente caso de estudo nunca chega a atingir o estado assimétrico estacionário observado nos escoamentos no *cross-slot* padrão, onde o ponto de estagnação coincide com o centro geométrico da malha. Esta assimetria pode ser considerada como uma resposta do escoamento à natureza altamente compressiva a que as partículas do fluido são sujeitas a montante do ponto de estagnação tendo como analogia o fenómeno de "*buckling*" observado em vigas longas e jatos de fluidos viscosos [4]. Como no caso de estudo presente as entradas de escoamento são adjacentes, o ponto de estagnação deixa de corresponder ao centro geométrico da bifurcação e desloca-se para o vértice inferior direito, ou seja, até é possível que a elevada compressão do fluido possa causar instabilidades na zona do ponto de estagnação, mas como o escoamento passa a corte a jusante deste ponto não se chega a instalar nenhuma assimetria em estado estacionário.

### 6.2.1.3 Tensão de corte

Os valores de tensão de corte característica ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ) deste escoamento, representados na figura 6.6, dão um bom exemplo dos efeitos do aumento da elasticidade dos fluidos.

A primeira observação é relativa ao surgimento de uma concentração de tensões de corte negativas que se estende desde o cruzamento dos escoamentos de entrada até ao centro da bifurcação e cuja magnitude aumenta com  $Wi$ . A crescente elasticidade do fluido leva a uma ligeira compressão das partículas nesta região e a velocidade do fluido toma valores próximos de zero (comparação com os perfis anteriores).

Também são observáveis algumas tensões de corte negativas nas zonas dos vértices superior direito e inferior esquerdo, possivelmente devido a efeitos de recirculação nas imediações.

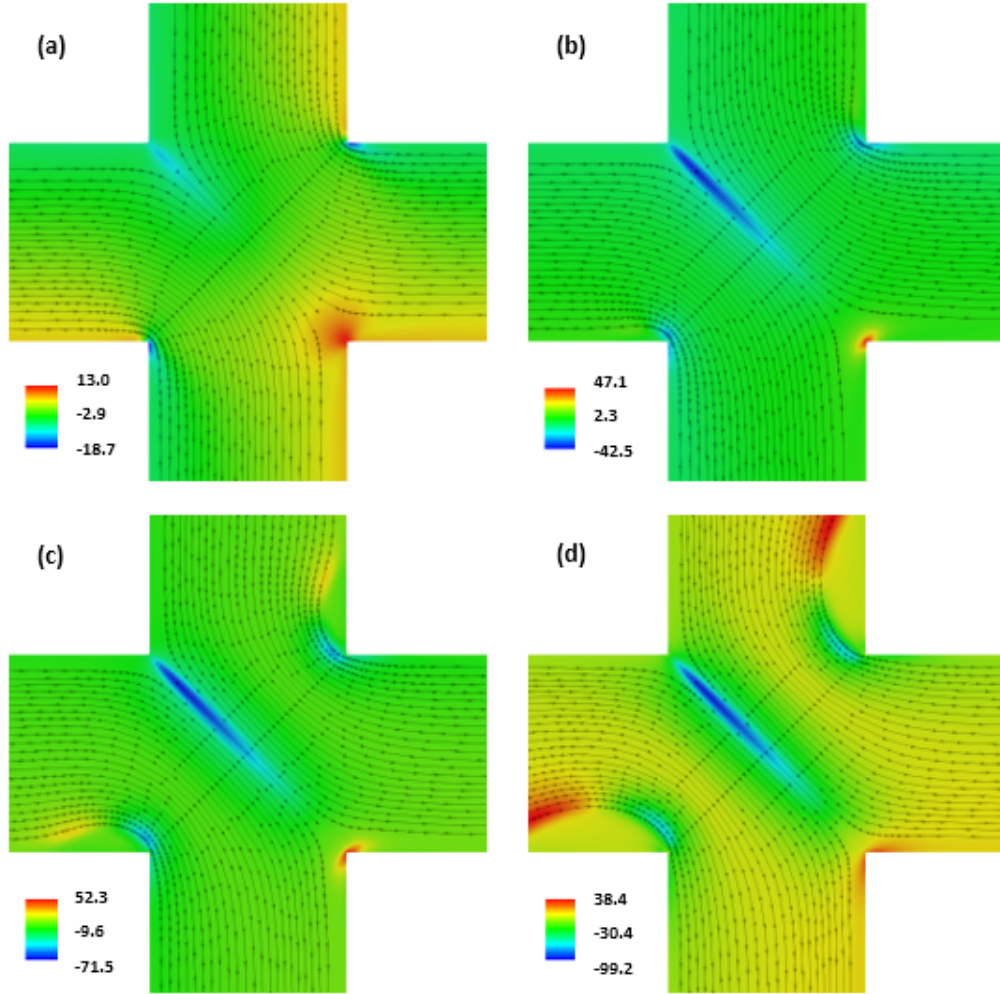


Figura 6.6: Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.4$ , (c)  $Wi=0.8$  e (d)  $Wi=1.26$  (crítico).

Na região do ponto de estagnação (vértice inferior direito) existe uma concentração de tensões de corte positivas, que pode ser associada à zona de alta taxa de deformação do fluido mencionada anteriormente, onde o escoamento passa de extensional a corte. No caso do  $Wi$  crítico esta concentração de tensões parece que alivia e distribui-se nas paredes da geometria a jusante do ponto de estagnação.

Com o desenvolvimento dos fenómenos de recirculação anteriormente mencionados, nos escoamentos a  $Wi$  mais elevado, surgem também tensões de corte positivas nas suas imediações, cuja intensidade aumenta com a elasticidade.

#### 6.2.1.4 Diferença das tensões normais

A figura 6.7, representa os mapas da primeira diferença das tensões normais, na sua forma adimensional ( $N_1/[\eta U/H] = (\tau_{xx} - \tau_{yy})/[\eta U/H]$ ).

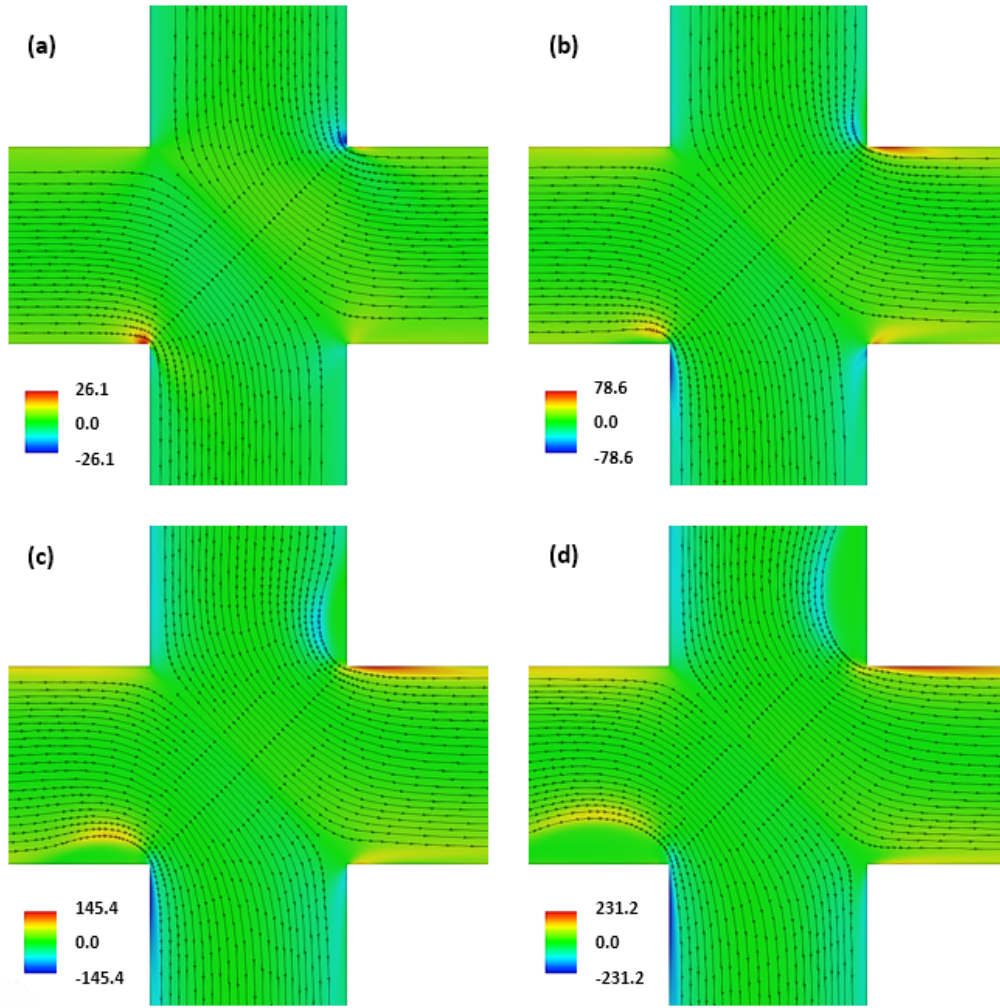


Figura 6.7: Mapas da primeira diferença das tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo UCM a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.4$ , (c)  $Wi=0.8$  e (d)  $Wi=1.26$  (crítico).

O campo de  $N_1$  mantém-se maioritariamente nulo para todas as simulações, com apenas algumas regiões de tensões normais elevadas localizadas. No primeiro caso, de elasticidade praticamente nula ( $Wi = 0.1$ ), existem apenas dois picos de tensão, localizados imediatamente a montante dos vértices superior direito e inferior esquerdo (imediações da recirculação) e uma ligeira distribuição de tensões na região das paredes a jusante destes vértices e do ponto de estagnação. Aumentando o  $Wi$ , estes picos tendem a difundir-se e a recuar no escoamento, acompanhando o surgimento das zonas de recirculação e a intensidade de  $N_1$  também aumenta.

Para valores de  $Wi$  mais elevados são identificadas tensões em quase todas as paredes da geometria, mais pronunciadamente a jusante dos vértices superior direito e inferior esquerdo.



### 6.2.2 Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.1$

Seguidamente observou-se o efeito da adição de um solvente viscoso no padrão do escoamento, recorrendo ao uso do modelo constitutivo Oldroyd-B. Nesta secção são analisados novamente os campos de velocidade, tensão e tipo de escoamento para um fluido com razão de solvente,  $\beta = 0.1$ .

#### 6.2.2.1 Velocidade

Comparando os mapas de velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ) apresentados na figura 6.8 com o primeiro caso (UCM), não são observáveis grandes diferenças, tanto no aspeto geral dos perfis, como no papel que o aumento da elasticidade desempenha no surgimento de fenómenos como recirculações e separação dos escoamentos.

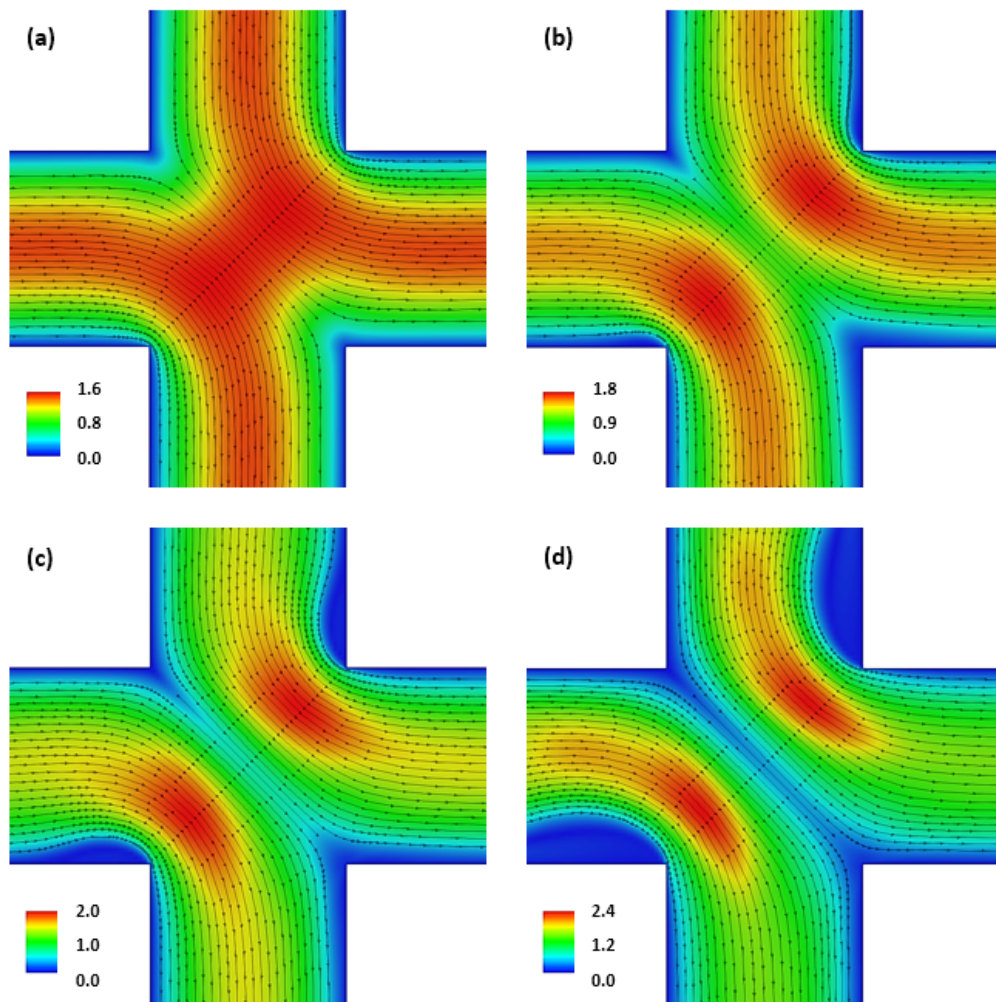


Figura 6.8: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.5$ , (c)  $Wi=1$  e (d)  $Wi=1.625$  (crítico).

A observação mais pertinente a fazer após a análise deste caso seria que a adição do solvente viscoso aparenta ter um efeito amenizador no surgimento de

instabilidades elásticas, causando um ligeiro aumento no valor de Weissenberg crítico ( $Wi_{crit} = 1.625$ ), o que vai em acordo com a literatura [6, 19]

### 6.2.2.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

À primeira vista, os campos apresentados na figura 6.9 não variam muito em forma quando comparados com os fluidos UCM.

É para os valores de  $Wi$  mais elevados que podemos observar uma redução nas zonas de rotação de corpo sólido (azul) e também uma ligeira redução de escoamento extensional nas saídas da bifurcação e continua a existir uma zona de compressão na direção do ponto de estagnação.

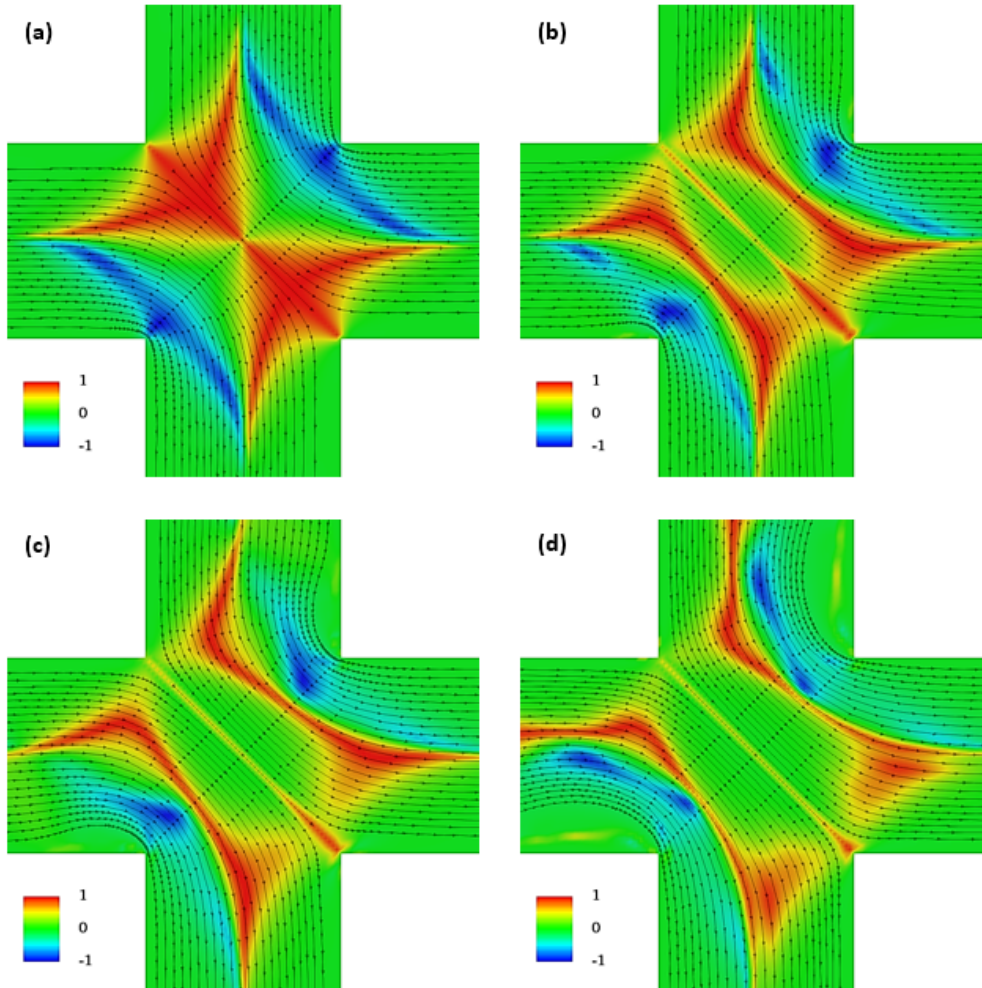


Figura 6.9: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.5$ , (c)  $Wi=1$  e (d)  $Wi=1.625$  (crítico).

### 6.2.2.3 Tensão de corte

Comparando os mapas da figura 6.10 com as tensões de corte no modelo UCM, estes são muito semelhantes. Continuam-se a observar tensões negativas nos vértices superior direito e inferior esquerdo que se difundem cada vez mais com  $Wi$  e parecem acompanhar a evolução das recirculações localizadas na mesma região. Com o aparecimento das recirculações surgem também tensões positivas na sua periferia.

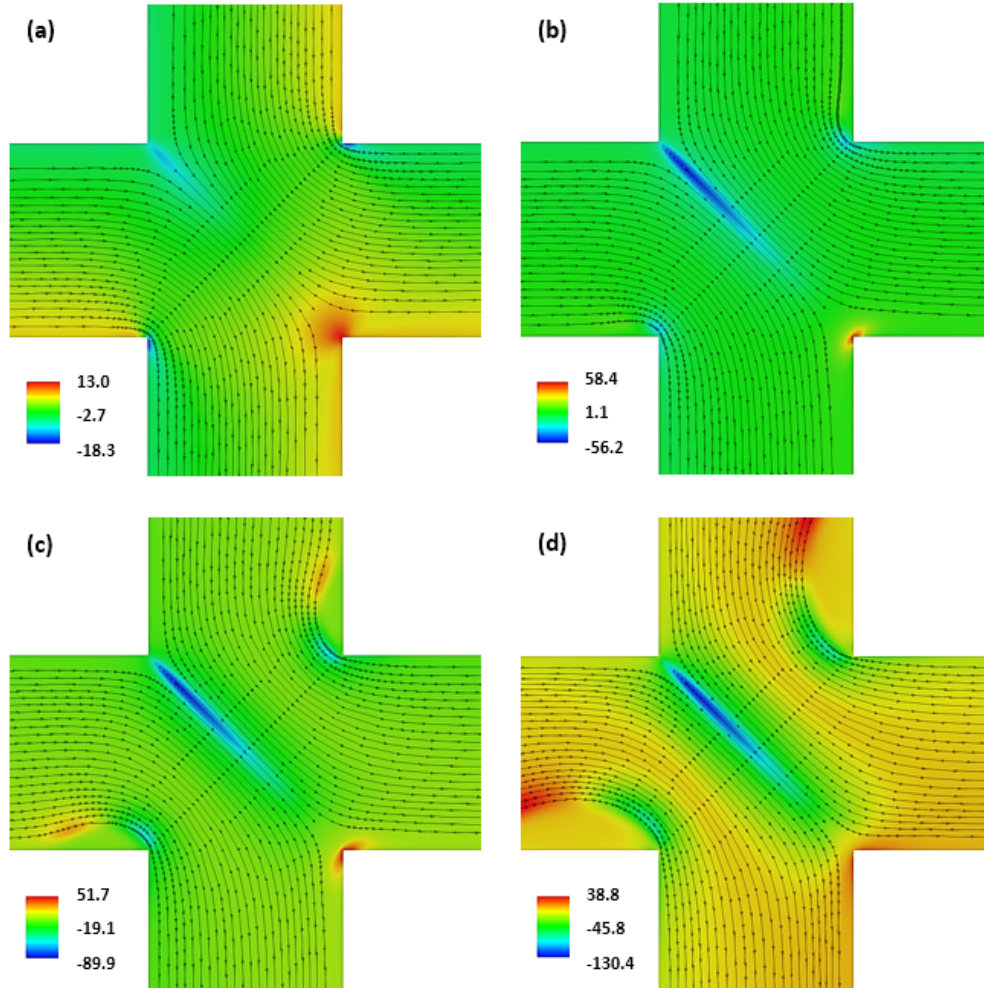


Figura 6.10: Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.5$ , (c)  $Wi=1$  e (d)  $Wi=1.625$  (crítico).

A concentração de tensões na região do ponto de estagnação continua presente e, tal como no fluido UCM, diminui em área com o aumento de  $Wi$  até se estabelecerem as instabilidades ( $Wi = 1.625$ ), difundindo-se pelas paredes a jusante.

De referir que tanto as tensões positivas como negativas aqui identificadas tomam intensidades ligeiramente superiores ao modelo UCM, mas também os valores de  $Wi$  dos fluidos apresentados são maiores.



#### 6.2.2.4 Diferença das tensões normais

Tal como nos casos anteriores, o aspeto dos campos de  $N_1$  para este modelo assemelha-se muito ao caso UCM.

Analisando a figura 6.11 podemos novamente ver dois picos de  $N_1$  na zona dos vértices superior direito e inferior esquerdo que, com o aumento da elasticidade do fluido distribuem-se pelas paredes a jusante e pela periferia das recirculações que surgem a montante, aumentando também em intensidade.

É também possível observar o surgimento de tensões nas paredes a montante do vértice superior esquerdo e também na região do ponto de estagnação, que aparentam distribuir-se cada vez mais uniformemente pelas paredes a jusante, com o aumento de  $Wi$ .

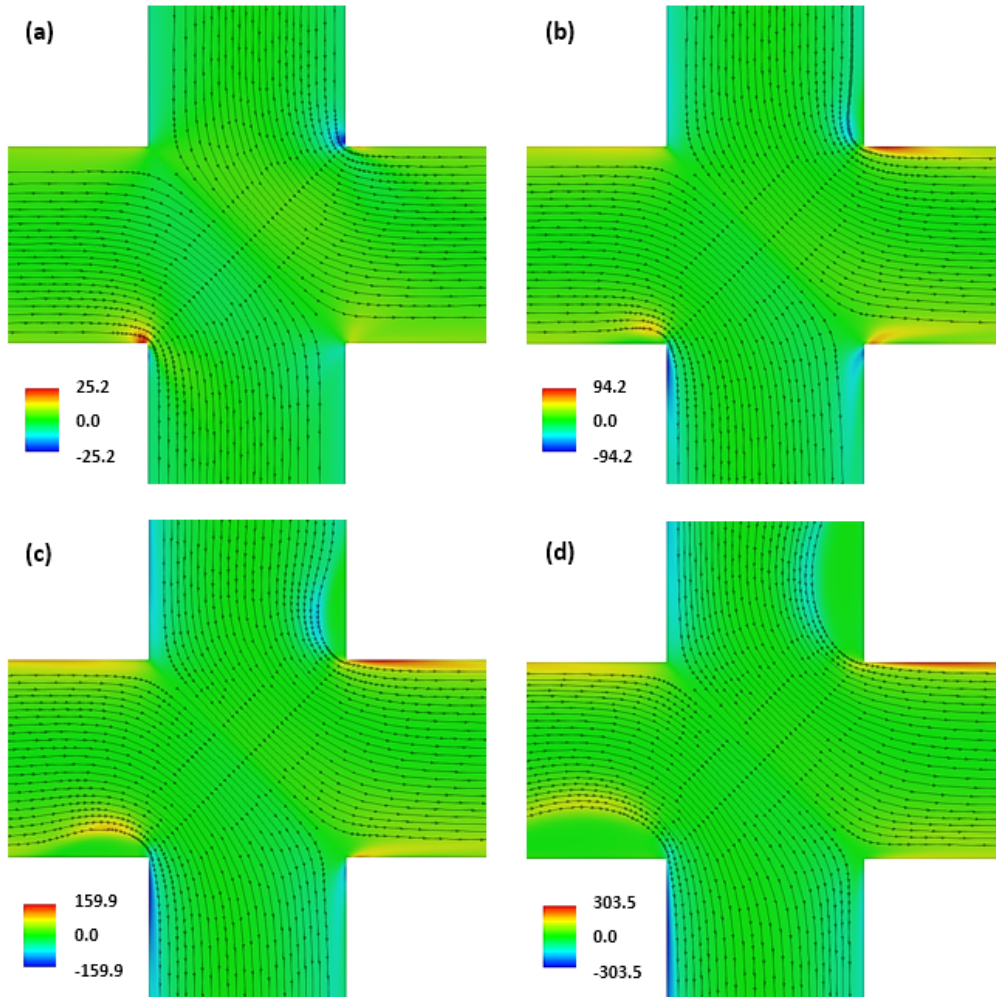


Figura 6.11: Mapas da diferença de tensões normais ( $N_1/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.5$ , (c)  $Wi=1$  e (d)  $Wi=1.625$  (crítico).



De notar que, apesar das semelhanças no aspeto, o mapa de  $N_1$  para o modelo Oldroyd-B apresenta intensidades mais elevadas que no caso UCM, provavelmente por estarmos a lidar com valores de  $Wi$  ligeiramente superiores.

### 6.2.3 Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.5$

Para verdadeiramente avaliar o efeito da introdução de um solvente viscoso foi necessário realizar mais simulações para valores de  $\beta$  superiores. Ao analisar os resultados dos fluidos com  $\beta = 0.5$  já é possível identificar certas discrepâncias com os resultados dos casos apresentados nas secções anteriores.

#### 6.2.3.1 Velocidade

Em relação aos campos apresentados na figura 6.12, a primeira observação que se pode fazer é que, de facto, a adição do solvente aparenta ter um efeito estabilizador nos fenómenos elásticos identificados anteriormente, como já se suspeitava no caso dos fluidos com  $\beta = 0.1$ .

Apesar de menos pronunciados, estes efeitos não deixam de estar presentes e a separação dos escoamentos continua a aumentar com a elasticidade, mas o fluido não chega a atingir velocidades tão reduzidas nesta região como para  $\beta = 0$  (UCM) ou  $\beta = 0.1$ , para valores de  $Wi$  superiores.

Ainda se verifica o surgimento de recirculações na região a montante dos vértices superior direito e inferior esquerdo, que se intensificam com  $Wi$ , no entanto, apesar dos valores de  $Wi$  serem superiores nestes escoamentos, é claro que o fenómeno é mais reduzido para este modelo.

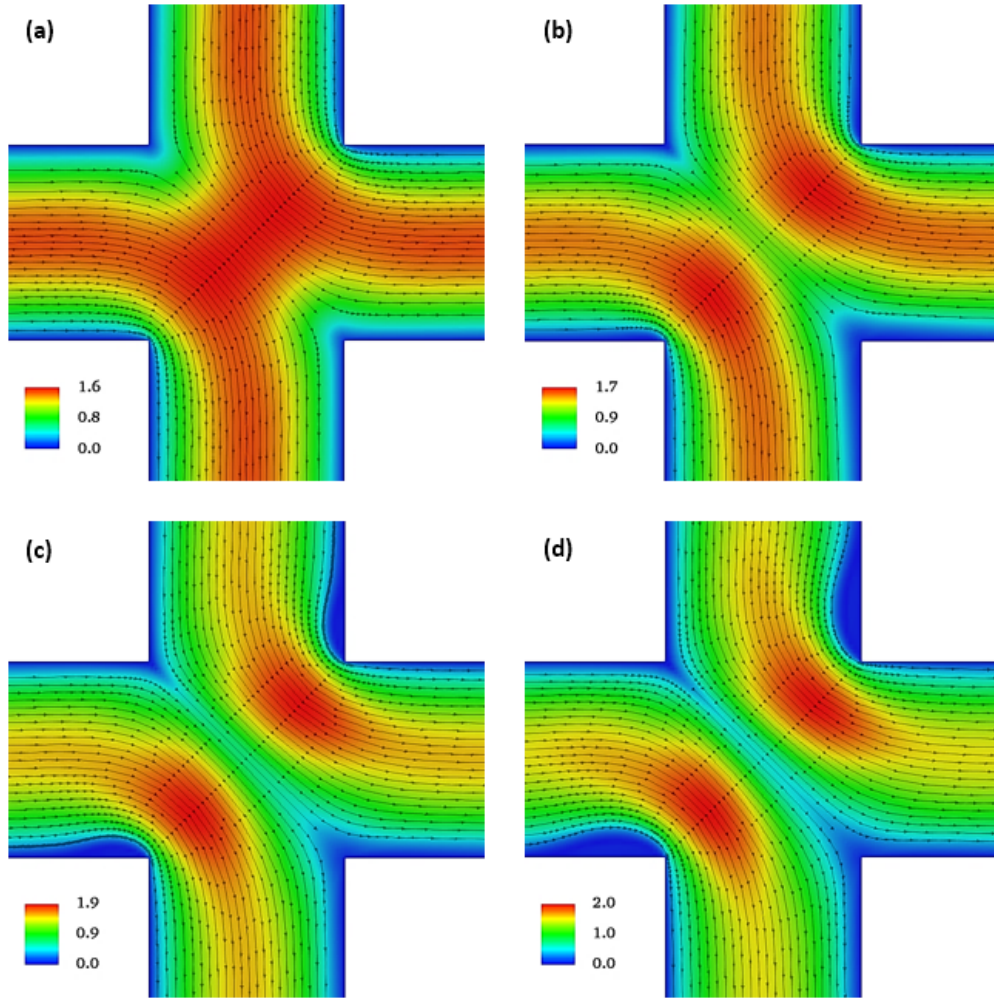


Figura 6.12: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.7$ , (c)  $Wi=1.4$  e (d)  $Wi=2.05$  (crítico).

### 6.2.3.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

Antes de se fazer uma análise pormenorizada aos resultados presentes na figura 6.13 é já bastante claro o papel que a introdução de um solvente tem na uniformização do escoamento.

Continuamos a ter regiões de escoamento extensional que se afastam do centro da bifurcação com o aumento de  $Wi$  mas bastante mais organizadas, mesmo para  $Wi$  crítico, que nos modelos analisados anteriormente.

Tal como no caso dos fluidos com  $\beta = 0.1$  as regiões azuis, de rotação de corpo sólido, diminuem de intensidade com o aumento de  $Wi$ , mas também mantendo um aspeto mais coeso.

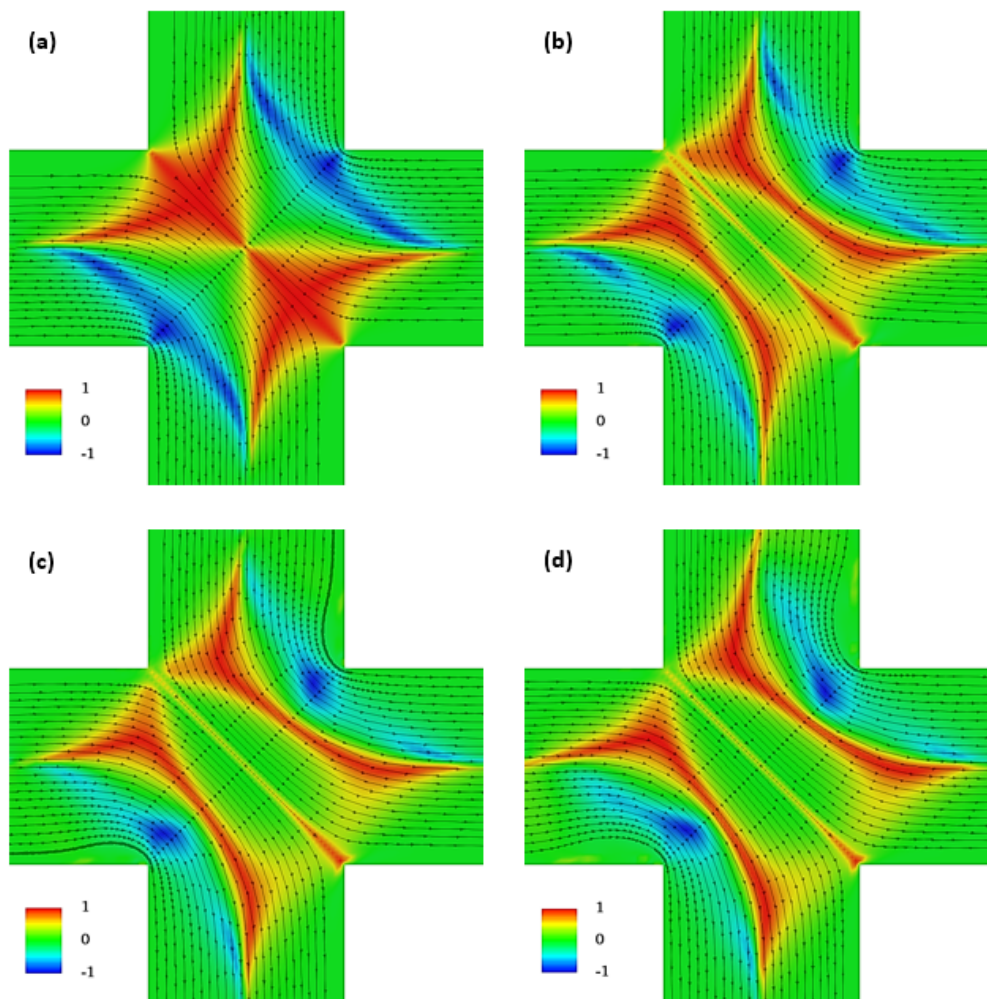


Figura 6.13: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.7$ , (c)  $Wi=1.4$  e (d)  $Wi=2.05$  (crítico).

### 6.2.3.3 Tensão de corte

Os mapas de tensão de corte na figura 6.14 são mais uma prova do efeito estabilizador do solvente viscoso.

É possível observar novamente o desenvolvimento de tensões negativas na separação dos escoamentos, cuja intensidade aumenta com  $Wi$ , mas o tamanho desta região é consideravelmente inferior ao dos casos descritos anteriormente, o que pode ser comparável ao facto desta separação não ser tão pronunciada nos resultados da velocidade deste modelo também.

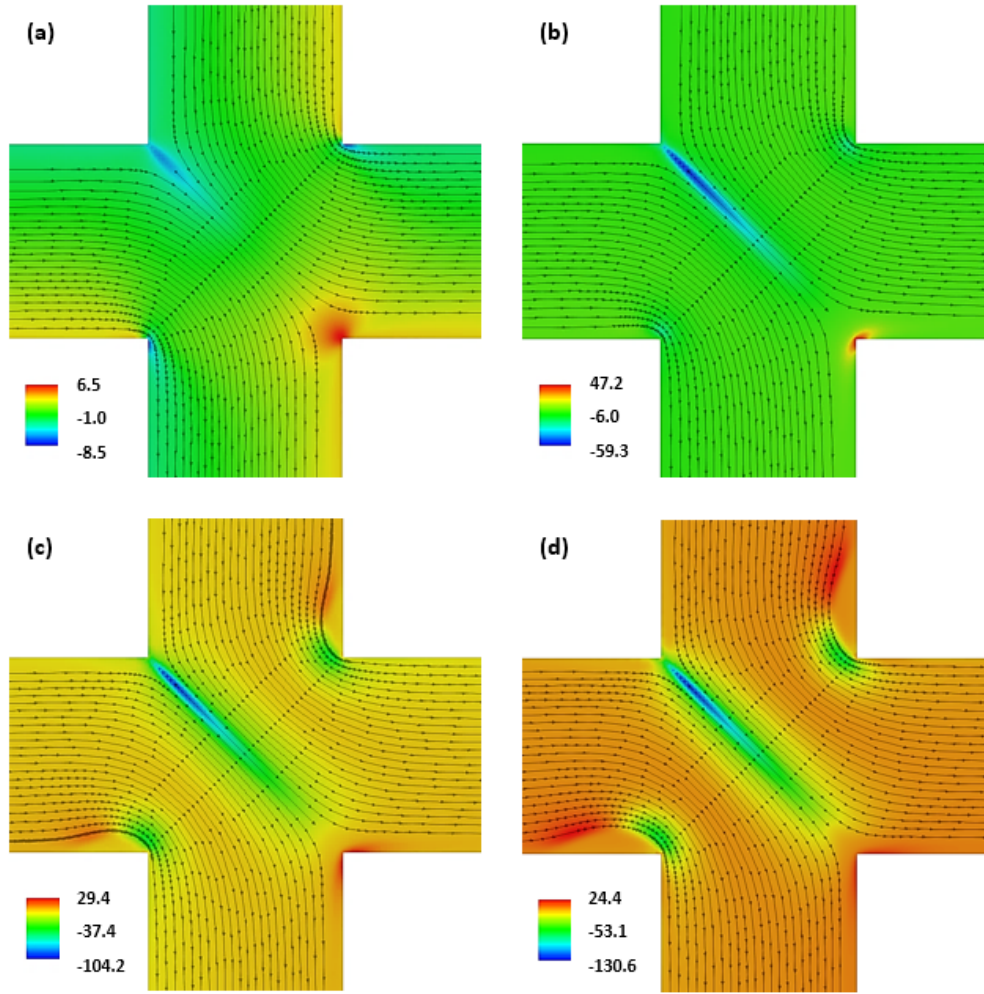


Figura 6.14: Mapas da tensão de corte ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.7$ , (c)  $Wi=1.4$  e (d)  $Wi=2.05$  (crítico).

As tensões negativas localizadas nos vértices superior direito e inferior esquerdo também reduzem em intensidade quando comparadas com os dois casos anteriores, ou seja, todos os fenómenos devido à elasticidade até agora relatados parecem diminuir com o aumento da contribuição do solvente ( $\beta$ ).

De referir também que a concentração de tensões na zona do ponto de estagnação difunde-se nas paredes a jusante bastante antes de se atingir o  $Wi$  crítico, no entanto, as simulações para este caso foram realizadas também para valores de elasticidade superiores aos dos casos anteriores.

#### 6.2.3.4 Diferença das tensões normais

De todas as variáveis,  $N_1$  é sem dúvida a mais incerta. Inicialmente, analisando os casos de  $\beta = 0$  e  $\beta = 0.1$  seria seguro assumir que a introdução do solvente causa



um aumento não só da intensidade das tensões normais localizadas, como também da região afetada por estas tensões.

Observando a figura 6.15, pode-se ver que esse claramente não é o caso.

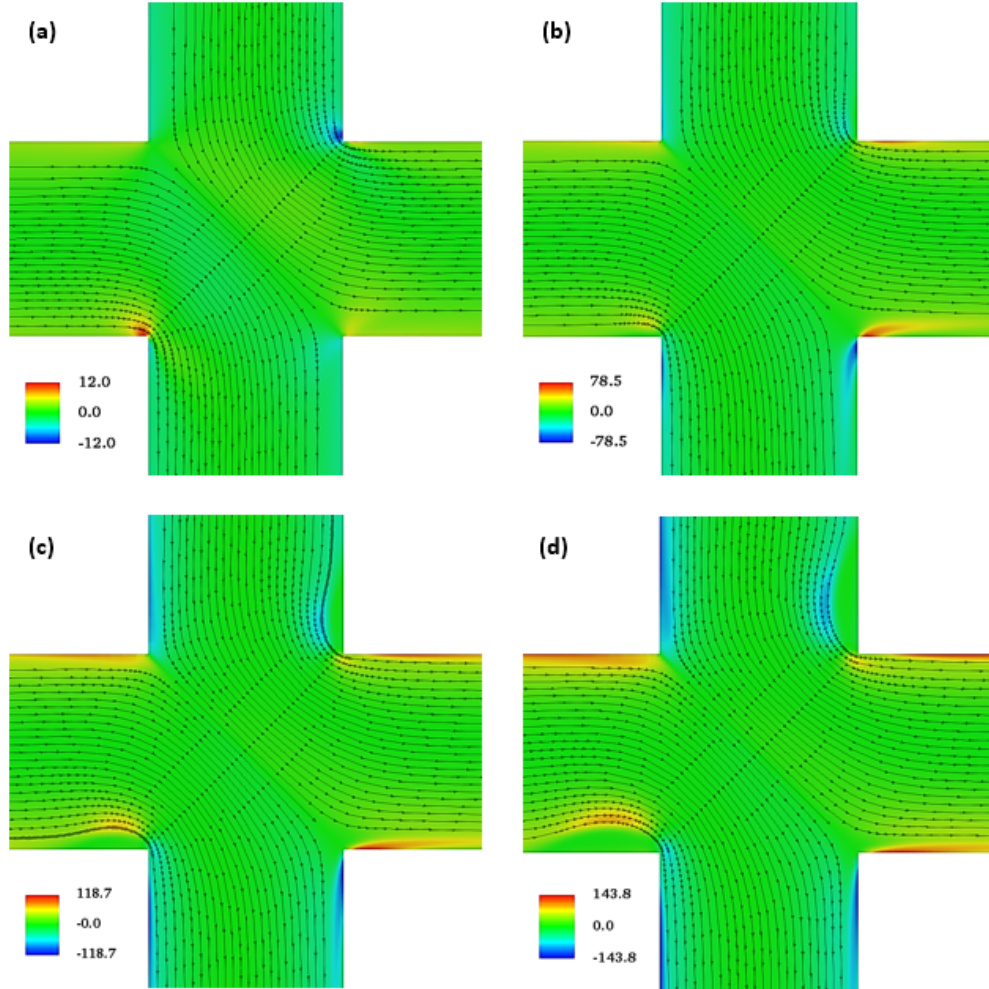


Figura 6.15: Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=0.7$ , (c)  $Wi=1.4$  e (d)  $Wi=2.05$  (crítico).

O aumento da elasticidade dos fluidos continua a traduzir-se num aumento da intensidade de  $N_1$ , apesar de nunca atingir valores próximos dos casos anteriores.

O aumento de  $Wi$  também implica, novamente, o desfasamento das tensões localizadas nos vértices superior direito e inferior esquerdo através das paredes a jusante e das recirculações a montante, provavelmente indicando uma relação entre estas tensões e o surgimento das recirculações.

Para os valores de  $Wi$  mais elevados as tensões que surgem junto às outras

paredes, mais pronunciadamente a jusante do ponto de estagnação, apesar de já identificadas nos casos  $\beta = 0$  e  $\beta = 0.1$  abrangem regiões bastante maiores neste caso ( $\beta = 0.5$ ).

É possível que a introdução do solvente cause uma redução nas tensões normais do escoamento, no entanto, por causar também um aumento no valor crítico de  $Wi$  e sendo que os valores de  $Wi$  apresentados no caso de  $\beta = 0.1$  são superiores aos do modelo UCM, a introdução de solvente pode ser ainda tão reduzida que o seu efeito na intensidade de  $N_1$  não se equipara ainda ao efeito do aumento de  $Wi$ , aumentando assim os valores de  $N_1$ .

Para o caso de  $\beta = 0.5$  isto já não se verifica e apesar de lidarmos com valores de  $Wi$  superiores aos outros dois casos a intensidade de  $N_1$  torna-se inferior, no entanto, as regiões onde existem tensões normais tornam-se mais extensas, provavelmente resultado do aumento de  $Wi$ .

#### 6.2.4 Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.9$

Este foi o último caso estudado para o modelo Oldroyd-B. Como já foi verificado a variação do parâmetro  $\beta$  influencia significativamente, tanto a natureza do escoamento, como o desenvolvimento de fenómenos elásticos. Os resultados analisados aqui, em que a viscosidade do solvente é bastante superior à do polímero, são definitivamente os que se distanciam mais de todos outros casos.

##### 6.2.4.1 Velocidade

A primeira observação a fazer dos mapas da figura 6.16 é relativa às velocidades locais que são inferiores aos casos já analisados, apesar de se confirmar que a magnitude aumenta, de facto, com o aumento da elasticidade e estarmos perante fluidos com valores de  $Wi$  bastante superiores aos casos anteriores (quase o dobro).

De facto, confirma-se que o solvente viscoso reduz o efeito dos fenómenos elásticos e possui também um papel estabilizador no escoamento, sendo que quanto maior for  $\beta$ , maior será o  $Wi$  crítico, ou seja, mais dificilmente o escoamento se torna instável e dependente do tempo.

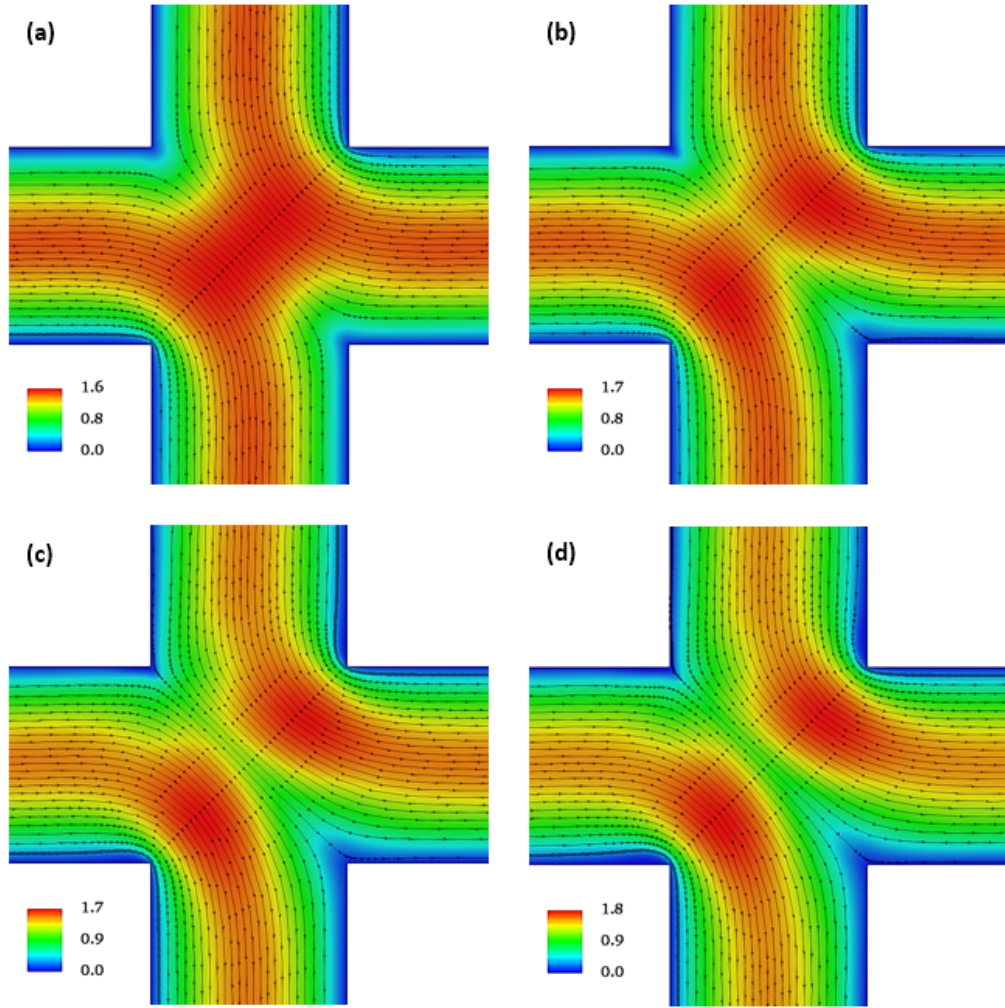


Figura 6.16: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.8$ , (c)  $Wi=3.5$  e (d)  $Wi=5.35$  (crítico).

Tanto a separação dos escoamentos na bifurcação como as recirculações nas paredes de entrada, identificadas anteriormente, são praticamente inexistentes neste caso. Apenas no caso de  $Wi_{crit} = 5.35$  é possível observar o surgimento de reduzidas zonas de recirculação.

A estrutura em forma de feijão na zona de separação, já observada a formar-se nos casos Oldroyd-B anteriores aparenta ser um efeito da região de escoamento extencional cada vez mais concentrada na entrada da bifurcação com o aumento de  $Wi$  e a introdução do solvente, que permite obter valores mais elevados de  $Wi$  acabando por afetar indiretamente este efeito.

### 6.2.4.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

Na análise do caso anterior ( $\beta = 0.5$ ) observou-se que o solvente também tem um efeito estabilizador na aspeto do escoamento. A figura 6.17 prova exatamente o mesmo já que tanto as regiões de escoamento extensional como as de rotação de corpo sólido continuam presentes, mas com um aspeto mais "limpo" e uniforme.

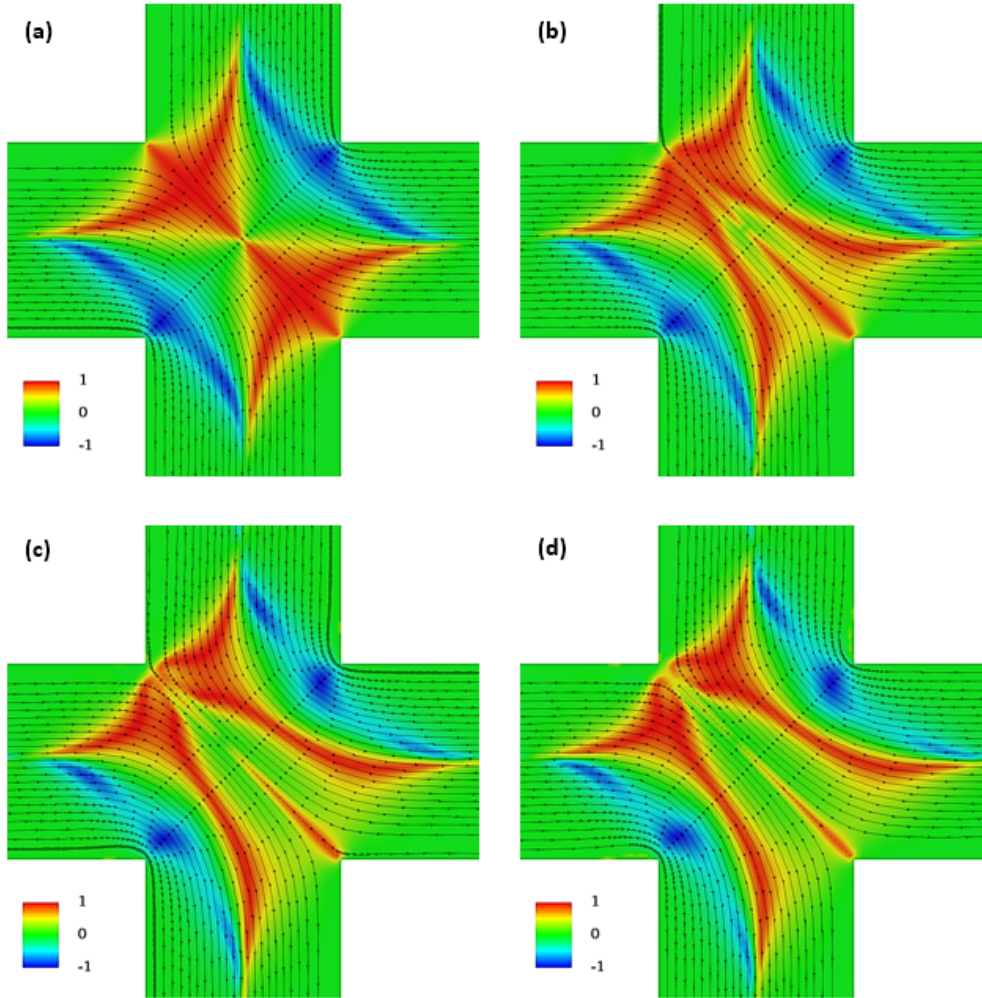


Figura 6.17: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.5$ , (c)  $Wi=3.5$  e (d)  $Wi=5.35$  (crítico).

Estes resultados vão de acordo com o observado também nas velocidades, em relação à estrutura de "feijão", onde as partículas do fluido são comprimidas à entrada da bifurcação em direção ao centro da geometria, mas seguidamente sofrem extensão na direção das condutas de saída, evitando o centro. Esta zona onde as partículas sofrem extensão coincide com um pico de velocidades.

As partículas do fluido que entram na bifurcação junto ao vértice superior esquerdo continuam a ser comprimidas na direção do ponto de estagnação, ainda



que, com ligeiramente mais intensidade que nos casos anteriores.

Também a região de escoamento de corte presente no centro da bifurcação ocupa uma área bastante reduzida, comparando com os modelos anteriores, apesar de ainda aumentar ligeiramente com o aumento de  $Wi$ .

#### 6.2.4.3 Tensão de corte

Em sintonia com o que já foi observado, o subsequente aumento de  $\beta$  reduz também os efeitos elásticos identificados nos mapas da tensão de corte.

Analisando a figura 6.18 confirma-se que as tensões negativas identificadas na zona de separação e nos vértices superior direito e inferior esquerdo reduzem não só em intensidade como também em área. Em relação às tensões nos vértices estas não se difundem com o aumento de  $Wi$ , ao contrário dos outros casos, mas também já foi observado que este é o caso em que se observa uma menor manifestação de recirculações nas paredes de entrada, ou seja, é claro que ambas se relacionam.

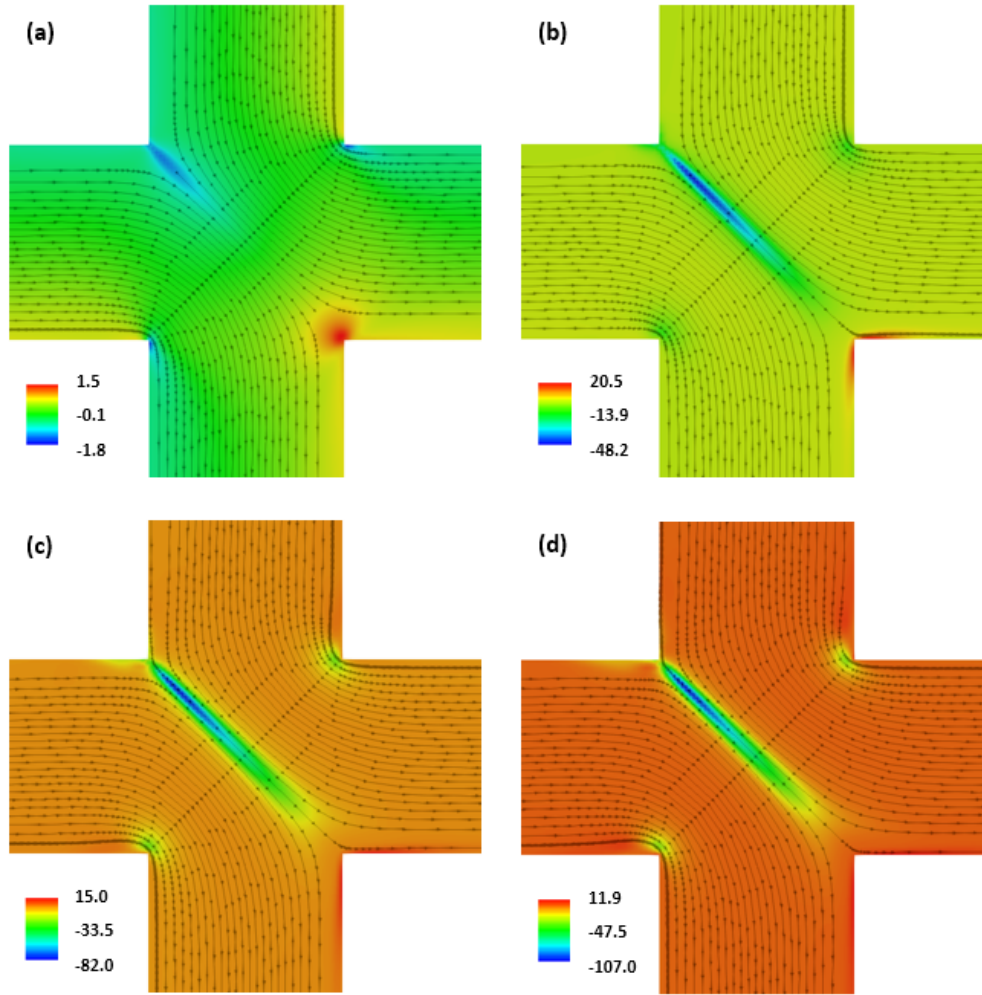


Figura 6.18: Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas para para para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.8$ , (c)  $Wi=3.5$  e (d)  $Wi=5.35$  (crítico).

Como observado também no caso anterior ( $\beta = 0.5$ ) a concentração de tensões positivas na região do ponto de estagnação é transferida para as paredes a jusante para elasticidades bastante inferiores ao valor crítico, sendo que este é um fenómeno puramente elástico e não causado pelo aparecimento das instabilidades.

#### 6.2.4.4 Diferença das tensões normais

O melhor exemplo do efeito estabilizador que a adição do solvente implica está apresentado na figura 6.19, mais corretamente, nos mapas de diferença de tensões normais aqui presentes.

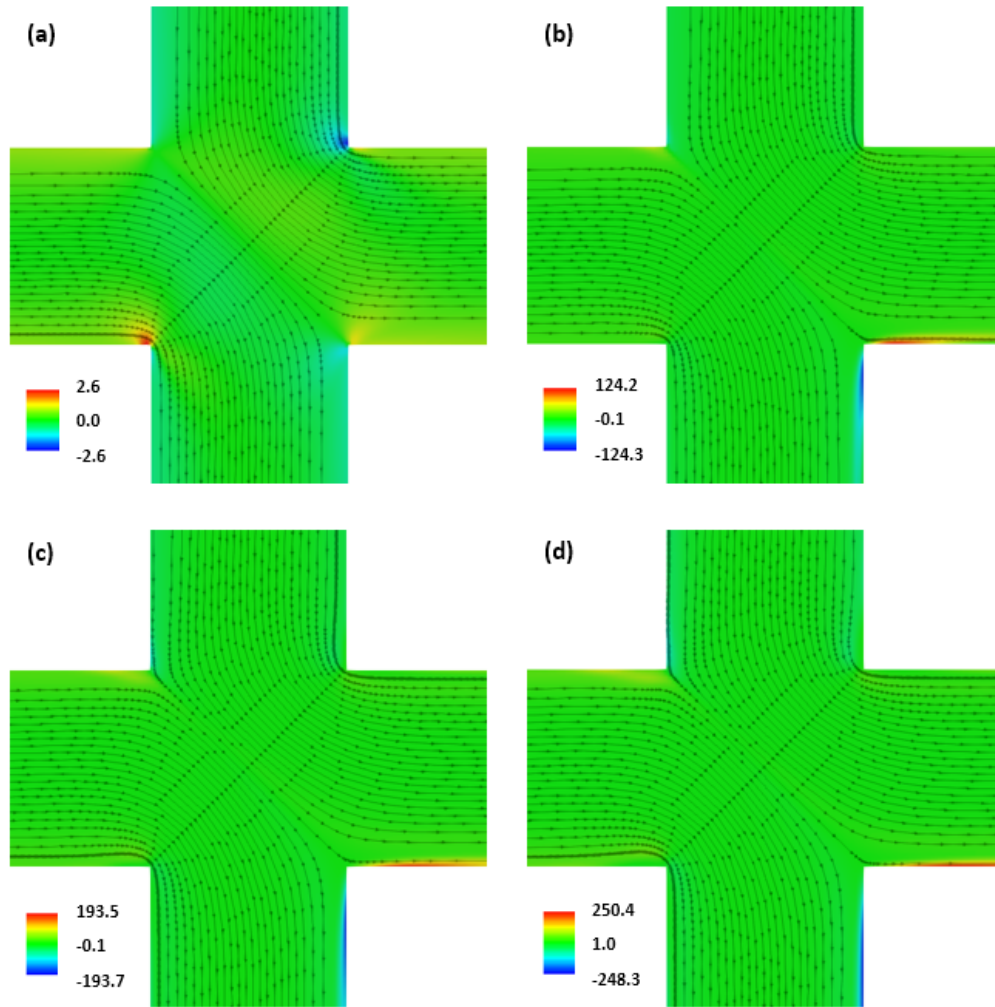


Figura 6.19: Perfil de tensões normais ( $N_1/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.9$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.8$ , (c)  $Wi=3.5$  e (d)  $Wi=5.35$  (crítico).

As tensões mais predominantes encontram-se nas paredes a jusante do ponto de estagnação e aumentam em intensidade com o aumento de  $Wi$ . De resto não há grandes observações a fazer, excepto talvez o surgimento de tensões muito fracas nas paredes a jusante do vértice superior esquerdo, onde os escoamentos inicialmente chocam. Para valores de  $Wi$  mais elevados é possível notar o aparecimento de tensões, quase inexistentes, nas regiões dos vértices onde se instalam as recirculações, também quase inobserváveis.

### 6.2.5 Modelo sPTT - $\varepsilon = 0.02$ e $\beta = 0$

Utilizando o modelo de Phan-Thien Tanner, é introduzido o parâmetro  $\varepsilon$ , que impõe um limite à extensibilidade das moléculas no escoamento. O modelo toma em consideração também a reofluidificação da viscosidade, aos contrários dos outros modelos apresentados.

Inicialmente, pretendia-se simular escoamentos para os mesmos valores de  $\beta$  estudados anteriormente ( $\beta = 0, 0.1, 0.5$  e  $0.9$ ), impondo valores de  $\varepsilon$  de  $0.02$  e  $0.25$ , para comparação. No entanto, como já mencionado no início deste capítulo, observou-se que introduzindo o parâmetro  $\varepsilon$ , torna-se bastante mais significativo o aumento do valor de  $Wi$  crítico com o aumento de  $\beta$ , tanto que, para um fluido com  $\varepsilon = 0.02$  e  $\beta = 0.2$  o valor crítico do número de Weissenberg não foi encontrado mesmo para  $Wi = 120$ . A partir destes valores torna-se difícil a realização das simulações em tempos aceitáveis.

Sendo assim são apresentados nesta secção os resultados dos casos simulados com o modelo sPTT, para os quais foi possível identificar o valor do número de Weissenberg crítico, nomeadamente para fluidos com  $\varepsilon = 0.02$  e  $\beta = 0$  e  $0.1$ .

#### 6.2.5.1 Velocidade

Foram encontradas várias semelhanças entre os mapas de velocidade apresentados na figura 6.20 e os do modelo UCM, sendo que os valores de  $Wi$  testados para os fluidos UCM são bastante inferiores.

Os efeitos elásticos voltam a verificar-se, nomeadamente a formação de zonas de recirculação a montante dos vértices superior direito e inferior esquerdo, que aumentam com a elasticidade do fluido e são bastante mais pronunciadas que no modelo UCM, o que faz sentido uma vez que estamos a lidar com valores superiores de  $Wi$ .

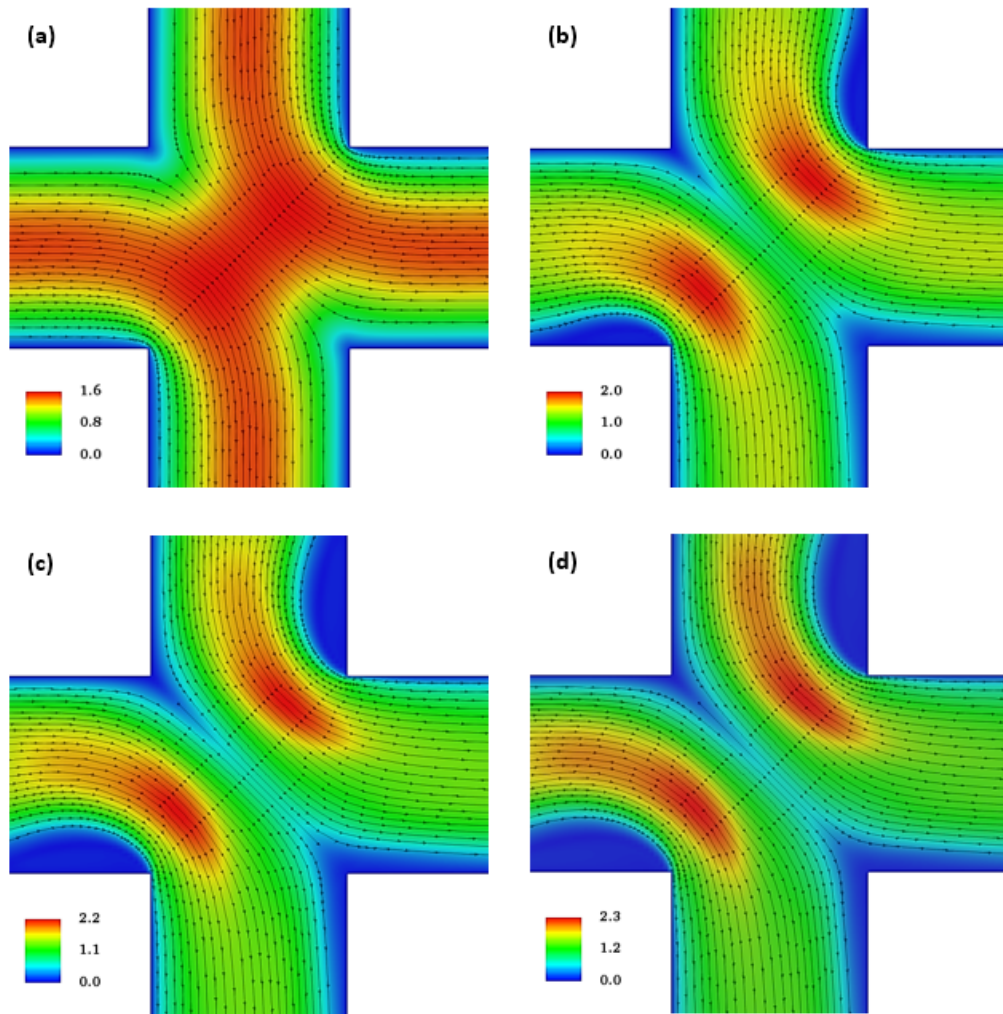


Figura 6.20: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo *sPTT* ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.5$ , (c)  $Wi=3.0$  e (d)  $Wi=4.3$  (crítico).

Novamente observa-se uma ligeira separação dos escoamentos, um pouco mais acentuada e bastante mais presente na entrada da bifurcação, sendo que volta a ocorrer união dos escoamentos antes de se atingir o ponto de estagnação e a sua área tende a aumentar com  $Wi$ .

#### 6.2.5.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

Uma vez que para este caso particular foram detetadas algumas variações nos mapas de  $\xi$ , que ocorrem fora do espectro visível da geometria demonstrado nos mapas anteriores, decidiu-se apresentar os resultados da figura 6.21 abrangendo uma maior área do *cross-slot*, para facilitar a compreensão dos fenómenos ocorrentes.

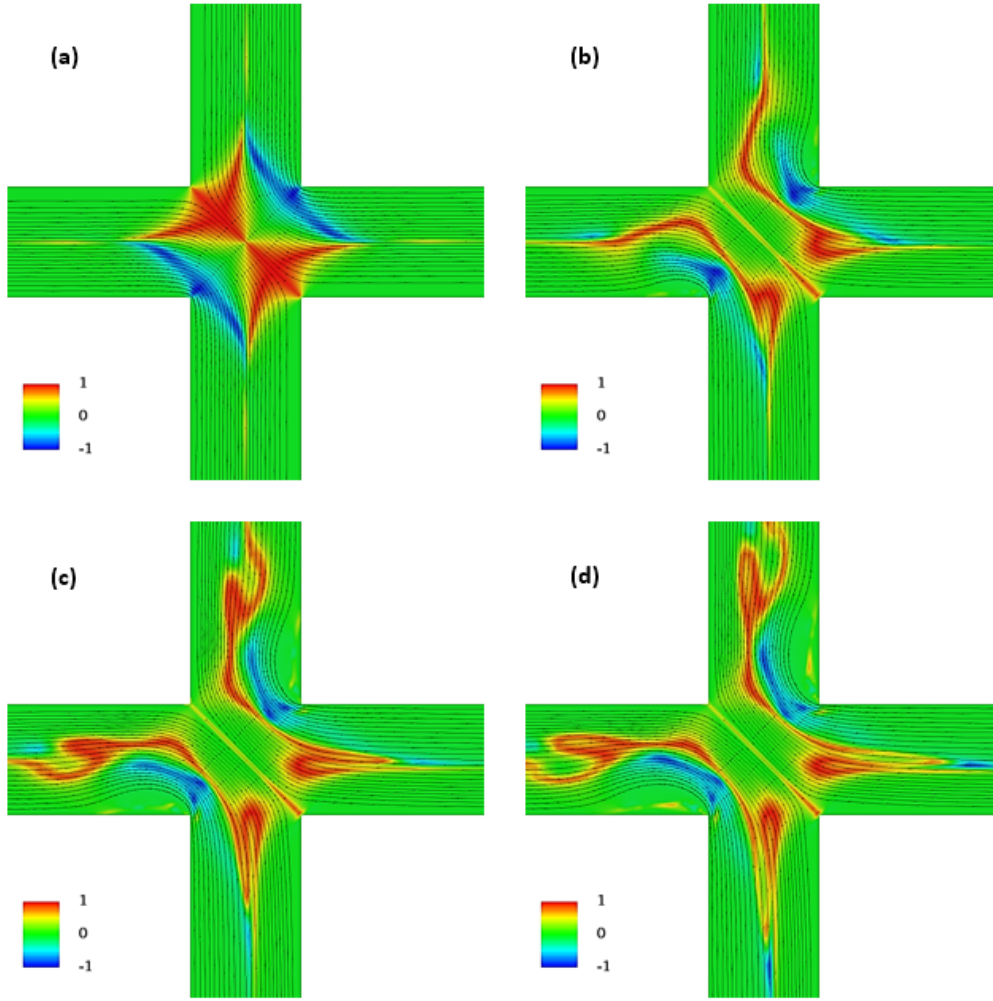


Figura 6.21: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.5$ , (c)  $Wi=3$  e (d)  $Wi=4.3$  (crítico).

Tal como acontece com as velocidades, encontram-se grandes semelhanças entre os mapas de  $\xi$  neste caso e os mapas de fluidos UCM, na região da bifurcação apesar da elasticidade mais elevada. Para valores de  $Wi$  próximos do crítico é possível identificar, para este caso, o aparecimento de escoamento extensional bastante pronunciado a montante das entradas na bifurcação.

### 6.2.5.3 Tensão de corte

Em termos de aspeto, os mapas de tensão de corte neste caso não diferem muito dos resultados para fluidos UCM, no entanto, é possível identificar os efeitos causados pelas altas elasticidades apresentadas neste caso.

Como podemos ver na figura 6.22 estão novamente presentes zonas de tensões de corte negativas, duas junto aos vértices superior direito e inferior esquerdo, associadas às crescentes recirculações na região. Também é identificada uma região de



tensões negativas na zona central da bifurcação, tal como nos fluido UCM, que combina bem com a zona de separação identificada nos resultados da velocidade. Aqui observa-se bem o efeito da elasticidade pois apesar da similaridade com o modelo UCM as tensões aqui avaliadas são bastante inferiores.

São novamente identificadas tensões de corte positivas na periferia das recirculações que também evoluem com o aumento da elasticidade.

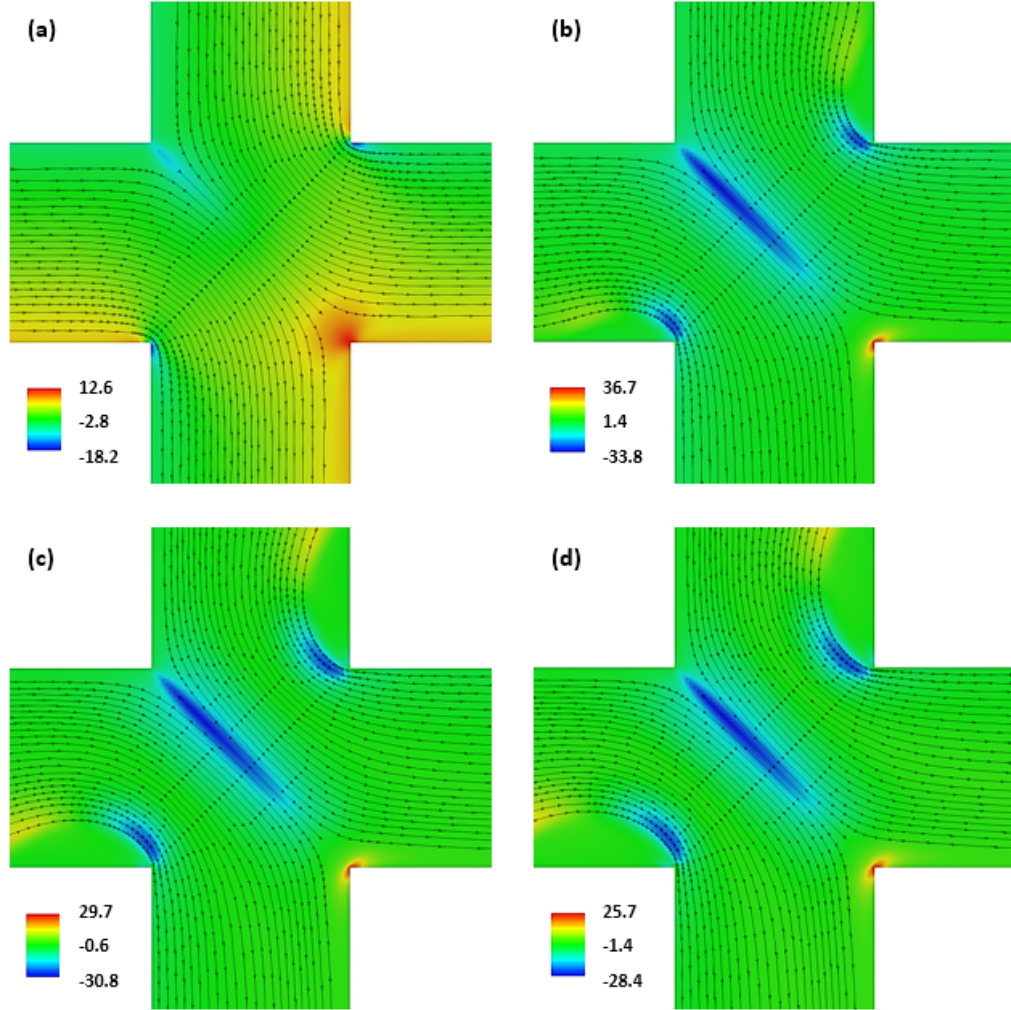


Figura 6.22: Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo *sPTT* ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.5$ , (c)  $Wi=3.0$  e (d)  $Wi=4.3$  (crítico).

Uma diferença a relatar será a região do ponto de estagnação. Já tinha sido identificado nos casos anteriores um pico de tensões positivas nesta região, provavelmente devido à compressão que o fluido sofre no ponto de estagnação. Foi observado que, para valores de  $Wi > 1$  este pico difundia-se pelas paredes a jusante do ponto de estagnação e este fenómeno foi diretamente associado ao aumento da elasticidade, não se alterando muito com a variação de  $\beta$ . Apesar dos altos valores do número de

Weissenberg aqui presentes este fenómeno não chega a ocorrer, ou seja, é um efeito direto da introdução do parâmetro  $\varepsilon$  ao escoamento.

#### 6.2.5.4 Diferença das tensões normais

Como esperado os resultados das tensões normais na figura 6.23 não se afastam muito dos obtidos para os outros modelos. Mais uma vez observa-se o surgimento de tensões a jusante do ponto de estagnação, nas paredes a montante do vértice superior esquerdo, na periferia das recirculações identificadas a montante dos vértices superior direito e inferior esquerdo e também nas paredes a jusante deste vértices.

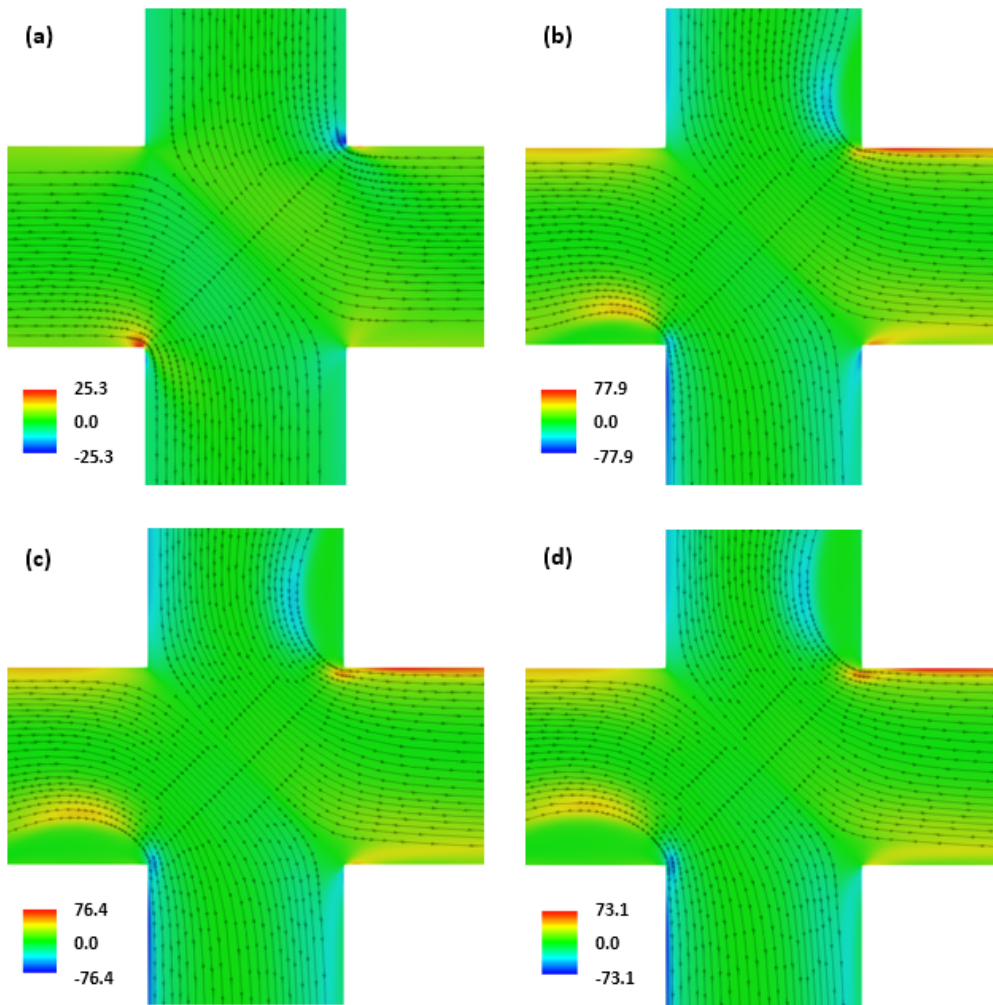


Figura 6.23: Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=1.5$ , (c)  $Wi=3.0$  e (d)  $Wi=4.3$  (crítico).

Os valores superiores de  $Wi$  traduzem-se em maiores regiões afetadas pelas tensões normais, apesar da intensidade ser bastante inferior aos valores detetados para o modelo UCM.



### 6.2.6 Modelo sPTT - $\varepsilon = 0.02$ e $\beta = 0.1$

Numa análise final do regime estacionário, foram estudados os efeitos da adição de um solvente viscoso ao escoamento, para o modelo sPTT. Em sintonia com o que já foi observado, a introdução do parâmetro  $\beta$  parece estabilizar os efeitos causados pela elasticidade do fluido.

#### 6.2.6.1 Velocidade

Os elevados valores de  $Wi$  dos escoamentos simulados para este modelo são o que chama mais à atenção. Ao combinar a introdução do parâmetro  $\varepsilon$  com o aumento de  $\beta$ , que já se verificou influenciar o valor crítico de  $Wi$ , este número toma valores bastante superiores, o que já provou dificultar a realização de simulações numéricas.

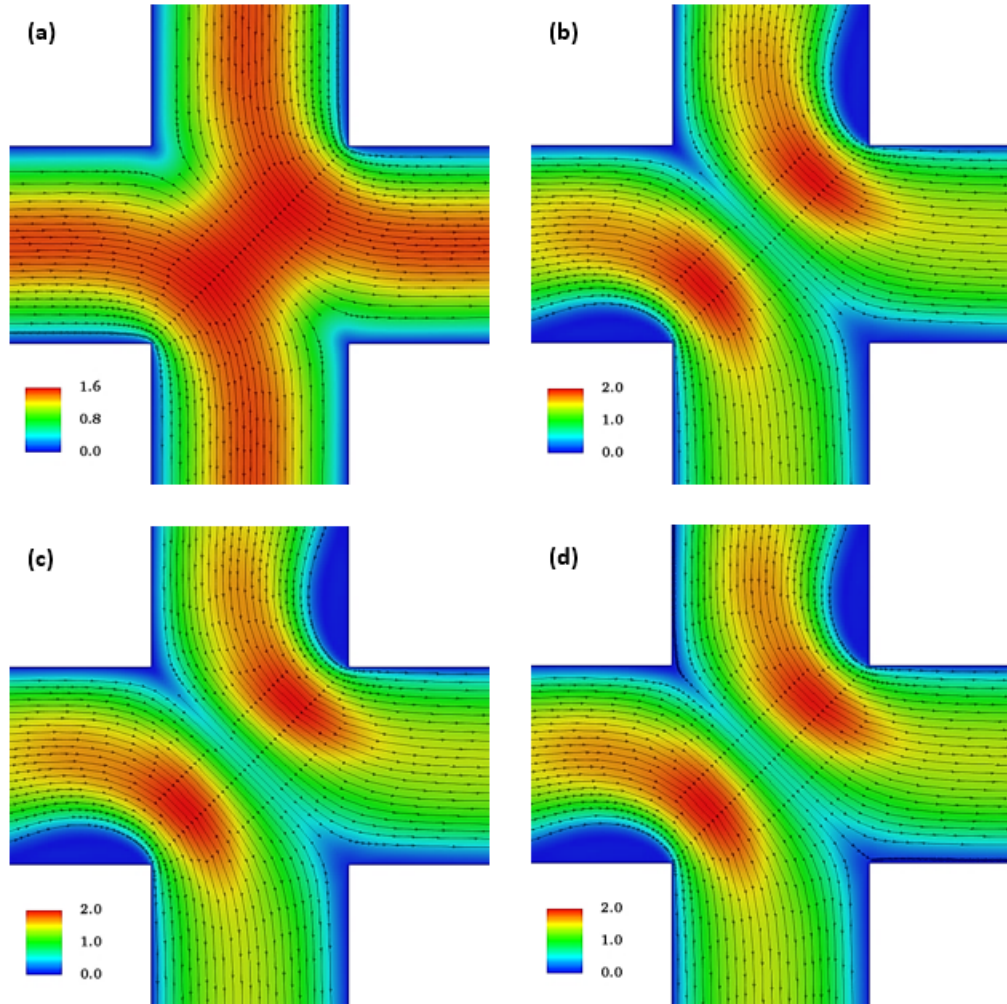


Figura 6.24: Mapas da magnitude da velocidade ( $\|\mathbf{u}\|/U$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=7$ , (c)  $Wi=13$  e (d)  $Wi=17.5$  (crítico).

Os efeitos da introdução do solvente são essencialmente os já observados para

os casos do modelo Oldroyd-B, ou seja, todos os efeitos elásticos observados no caso anterior ainda estão presentes, apesar de menos pronunciados, como se pode ver na figura 6.24.

Como já mencionado, tanto as zonas de recirculação como a separação dos escoamentos ainda são observáveis mas menos predominantemente e não variam muito com elasticidade a partir de  $Wi = 7$ .

#### 6.2.6.2 Tipo de escoamento (*flowType*)

Mais uma vez, os mapas de  $\xi$  são apresentados para uma maior área da geometria *cross-slot*, apenas para demonstrar que o fenómeno de escoamento extensional, observado nos canais de entrada no caso anterior, é mais um exemplo de um efeito elástico do escoamento que é reduzido com a introdução do solvente.

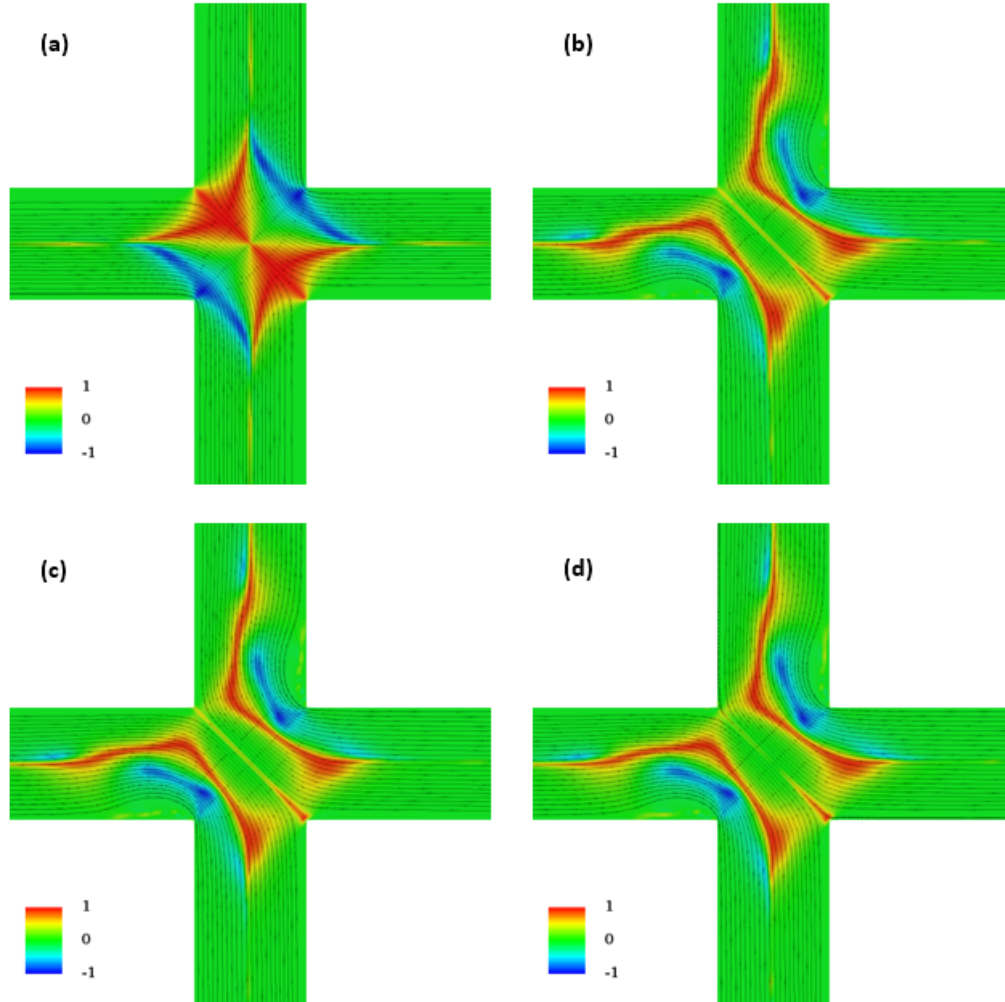


Figura 6.25: Mapas do parâmetro de tipo de escoamento ( $\xi$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo *sPTT* ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=7$ , (c)  $Wi=13$  e (d)  $Wi=17.5$  (crítico).

Tal como acontece no modelo Oldroyd-B, a introdução de  $\beta$  ajuda a estabilizar o escoamento. As regiões de escoamento extensional e rotação de corpo sólido mantêm uma forma similar ao caso anterior ( $\beta = 0$ ), mas mais concentradas e homogêneas. A compressão ocorrente no ponto de estagnação parece aumentar, no entanto.

### 6.2.6.3 Tensão de corte

Igualmente para os mapas de tensão de corte, a adição do solvente parece amenizar os fenómenos elásticos descritos em  $\beta = 0$  como pode ser observado na figura 6.26.

As zonas de tensões negativas, tanto na periferia das recirculações como na separação dos escoamentos apresentam áreas e intensidades inferiores às observadas no caso anterior. As tensões positivas na periferia das recirculações também reduzem em intensidade.

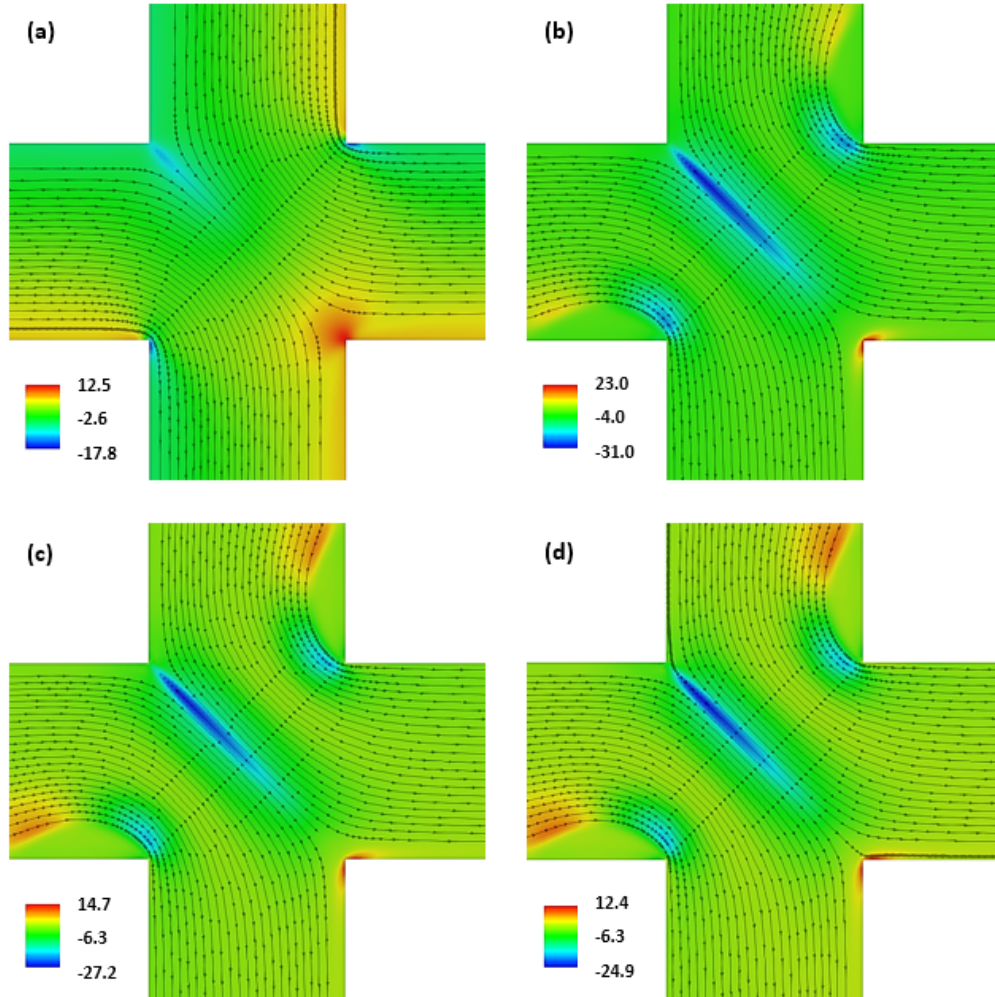


Figura 6.26: Perfil de tensões ( $\tau_{xy}/[1.111\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo *sPTT* ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=7$ , (c)  $Wi=13$  e (d)  $Wi=17.5$  (crítico).

Em relação ao ponto de estagnação é possível observar novamente que o pico de tensões positivas aí localizado distribui-se cada vez mais pelas paredes a jusante, com o aumento da elasticidade. É bastante claro que o valor de  $Wi$  contribui diretamente para este fenómeno, enquanto que a introdução do parâmetro  $\varepsilon$  aparenta reduzi-lo. O solvente, no entanto, não parece afetar este acontecimento, pelo menos diretamente, pois também já se observou que aumentar  $\beta$  permite obter escoamentos estacionários para valores de  $Wi$  superiores.

#### 6.2.6.4 Diferença das tensões normais

Finalmente, observando os resultados para  $N_1$  na figura 6.27 é claro que a intensidade das tensões é inferior ao caso  $\beta = 0$  e as áreas afetadas parecem reduzir, no entanto seriam necessários dados adicionais para tirar conclusões mais assertivas. De resto o campo de  $N_1$  é bastante similar ao do caso anterior.

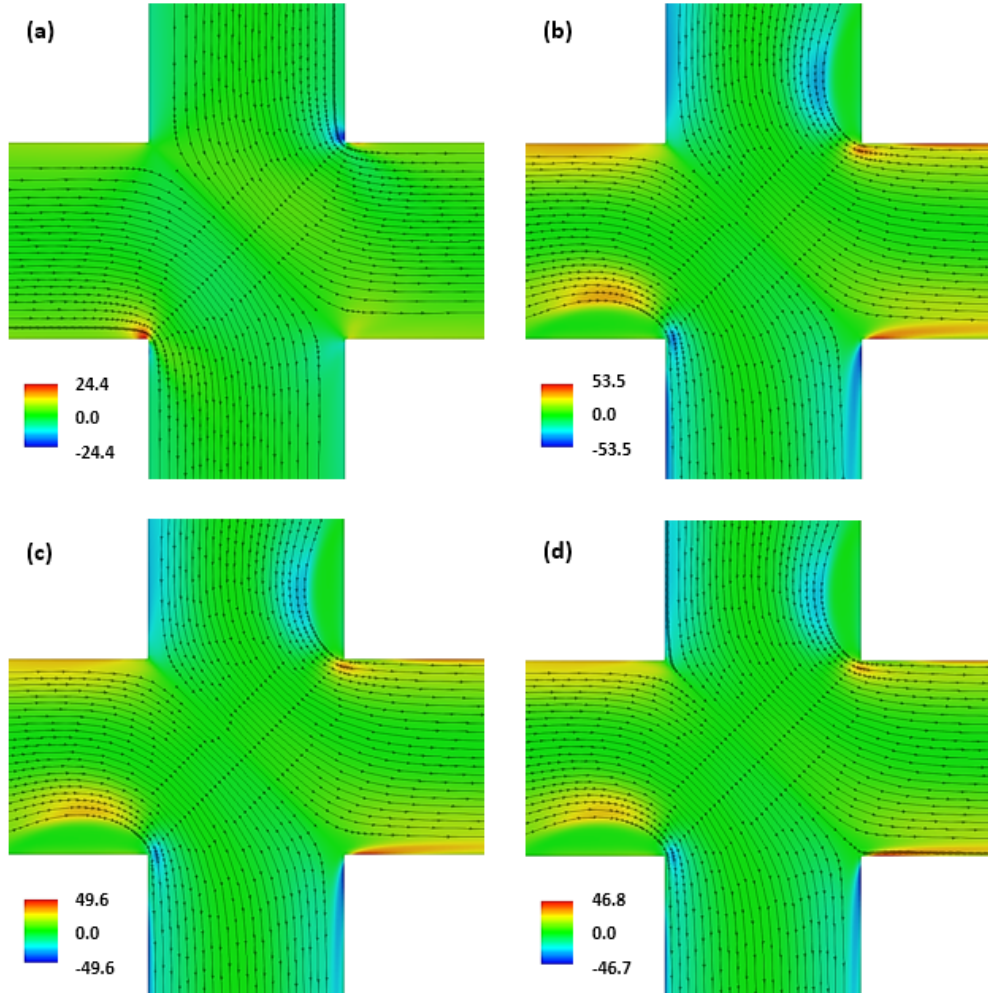


Figura 6.27: Perfil de tensões normais ( $N_1/[\eta U/H]$ ), com linhas de corrente sobrepostas, para o modelo sPTT ( $\varepsilon=0.02$ ;  $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=0.1$ , (b)  $Wi=7$ , (c)  $Wi=13$  e (d)  $Wi=17.5$  (crítico).

## 6.3 Regime não-estacionário

Após uma análise extensiva dos escoamentos estáveis neste caso de estudo e, com uma ideia bem definida dos valores de elasticidade críticos para cada modelo constitutivo e ainda das respectivas características do escoamento, foi possível proceder então ao estudo das instabilidades puramente elásticas que se estabelecem ao ultrapassar este  $Wi$  crítico.

A literatura [3, 4, 5, 6, 19, 7, 8, 9, 10] demonstra que, em escoamentos puramente elásticos, ultrapassando um certo valor de  $Wi$  o escoamento torna-se instável e dependente do tempo, sendo que os valores dos campos das variáveis do escoamento variam no tempo e, para valores próximos do  $Wi$  crítico, os escoamentos não-estacionários podem apresentar a forma de sinusoidais com períodos e amplitudes bem definidas.

Nesta secção será avaliado o comportamento de fluidos viscoelásticos utilizando os modelos constitutivos UCM e Oldroyd-B (para  $\beta=0.1$ ) em condições de escoamento que correspondem a números de Weissenberg superiores ao crítico. Por motivos de estabilidade numérica e limitações computacionais não foram estudadas as instabilidades para os restantes modelos apresentados anteriormente.

Para cada modelo selecionado são apresentados os gráficos de variação no tempo da componente axial da velocidade adimensionalizada ( $u_x/U$ ) para o centro da geometria (correspondente ao centro da bifurcação) e o correspondente domínio da frequência real para 4 fluidos diferentes, com números de Weissenberg cada vez maiores, começando sempre pelo fluido com valor de  $Wi$  crítico.

O objetivo é então avaliar a evolução das oscilações com o aumento de  $Wi$ , com especial atenção às frequências detetadas e à variação da sua amplitude.

### 6.3.1 Modelo UCM

Os dados obtidos da simulação de escoamentos não-estacionários, utilizando a equação constitutiva do modelo UCM, demonstram claramente o efeito da elasticidade nas oscilações observadas.

As instabilidades são inicialmente identificadas neste modelo para um fluido com o valor crítico de  $Wi = 1.26$ , ao qual corresponde, na célula central da geometria ( $x = 0$ ;  $y = 0$ ), uma velocidade axial ( $u_x/U$ ) com uma oscilação perfeitamente periódica de baixa amplitude e frequência, representada na figura 6.28(a).

Ao aumentarmos o valor de  $Wi$  para 1.4 surge uma nova harmónica de baixa intensidade, que ocorre ao dobro da frequência fundamental e também há um ligeiro aumento na amplitude das oscilações, como é demonstrado na figura 6.28(b).

Avançando para  $Wi = 1.8$  as oscilações aumentam consideravelmente, como demonstra a figura 6.28(c), acompanhadas de frequências bastante mais fortes, incluindo o surgimento de novas altas frequências que são múltiplos da frequência fundamental.

Para  $Wi = 2$  as instabilidades estão ainda mais presentes e é possível obser-



var na figura 6.28(d) que não só a amplitude das oscilações é bastante superior (a componente adimensional  $u_x/U$  chega a assumir valores negativos), como também surgem novos picos de frequência e bastante mais frequências altas, todas múltiplos das frequências fundamentais.

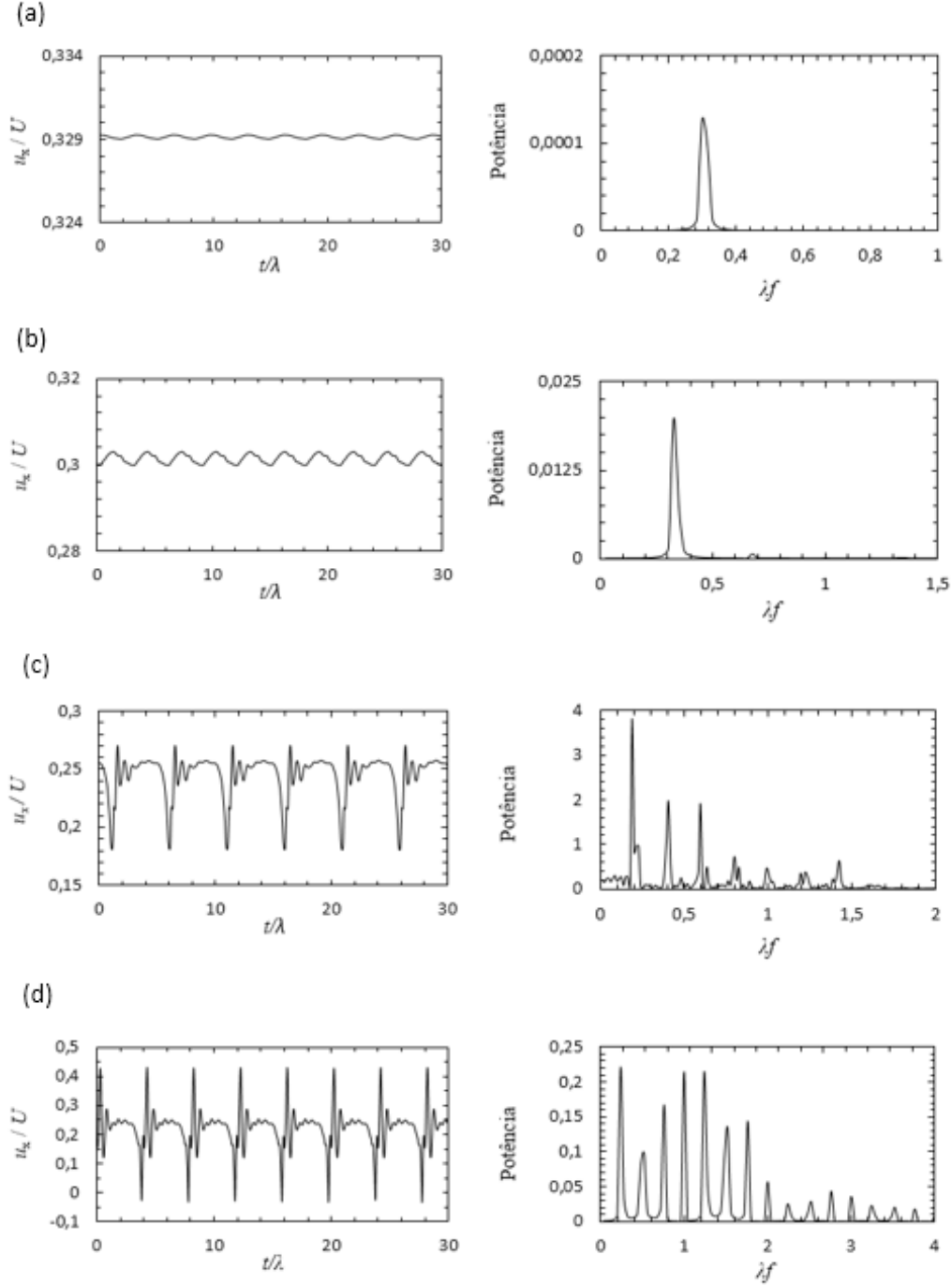


Figura 6.28: Variação da componente horizontal da velocidade no centro da geometria ( $x = 0$ ;  $y = 0$ ) e correspondente domínio da frequência para o modelo UCM a (a)  $Wi=1.26$  (crítico), (b)  $Wi=1.4$ , (c)  $Wi=1.8$  e (d)  $Wi=2$ .

Também através da análise da figura 6.29, torna-se mais fácil compreender os efeitos causados pela variação de  $Wi$  no escoamento dependente do tempo.

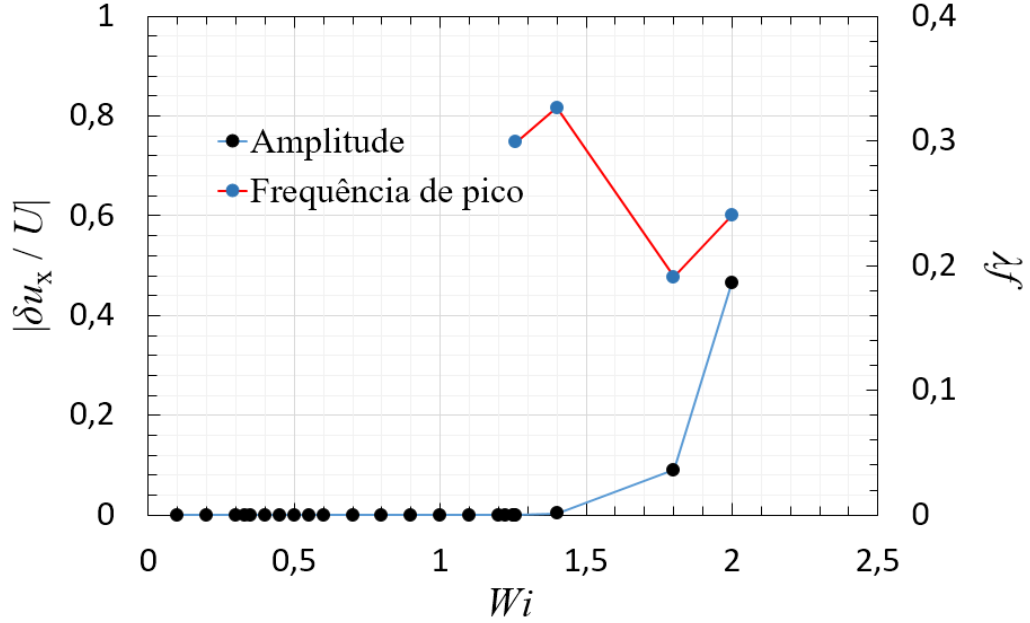


Figura 6.29: Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo UCM em função do número de Weissenberg.

Pode-se afirmar então que a amplitude das oscilações do escoamento tende a aumentar significativamente com a crescente elasticidade do fluido.

Claramente, é necessário aprofundar o estudo destes fenômenos, nomeadamente realizar mais simulações, tanto nesta gama de valores, como para valores de  $Wi$  superiores, podendo assim tirar conclusões mais definitivas. Há que ter em conta também que, apesar do escoamento ser bidimensional, este pode tornar-se tridimensional devido às instabilidades, pelo que seria necessário realizar um estudo numérico em 3D para verdadeiramente se observar o que ocorre.

#### 6.3.1.1 Variação dos campos no tempo

Para o caso do escoamento mais complexo observado, correspondente ao fluido UCM com  $Wi = 2$ , decidiu-se demonstrar o seu comportamento através do tempo apresentando a variação dos campos de velocidade, tensão e tipo de escoamento em mapas muito semelhantes aos apresentados nos casos de regime estacionário.

Na figura 6.30 é apresentado o gráfico de variação de  $u_x$  no tempo, na célula central da geometria, onde estão destacados os instantes de tempo correspondentes aos mapas das variáveis apresentadas.

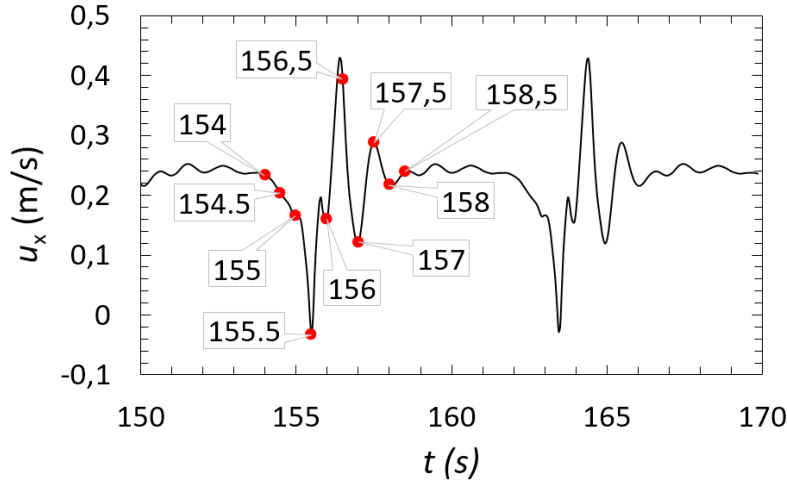


Figura 6.30: Variação temporal da componente horizontal da velocidade no ponto  $(x = 0; y = 0)$  para fluido UCM com  $Wi=2$ , com instantes de tempo escolhidos para análise realizados.

Observando a variação dos campos de  $\|u\|/U$  na figura 6.31 destacam-se duas situações. Aproximando do instante  $t = 155.5s$  o fluido escoar cada vez mais próximo dos vértices superior direito e inferior esquerdo, enquanto que no centro da bifurcação surge uma região onde a velocidade atinge valores muito próximos de zero. De notar que a componente horizontal da velocidade ( $u_x$ ) no centro da bifurcação é negativa para este instante, como foi observado na figura 6.30 e também desaparecem as zonas de recirculação nos canais de entrada.

Avançando para o instante  $t = 156.5s$ , que corresponde a um máximo de  $u_x$ , o escoamento volta ocupar toda a área da geometria. Nos últimos instantes o escoamento volta a estabilizar.

Relativamente aos mapas de  $\xi$  apresentados na figura 6.32 é possível detetar o desenvolvimento de duas regiões de escoamento extensional, nos canais à saída da bifurcação, aproximando do instante  $t = 155.5s$ . Seguidamente, no instante  $t = 156.5s$  domina o escoamento extensional dentro da bifurcação, sendo que a seguir também estabiliza e o mapa torna-se progressivamente semelhante ao observado no regime estacionário.

Os campos de tensão de corte apresentados na figura 6.33 facilitam bastante na compreensão destes fenómenos instáveis. É observável uma crescente acumulação de tensões negativas em toda a região da bifurcação e especialmente tensões positivas na periferia das zonas de recirculação, cada vez mais concentradas e mais próximas da bifurcação, até ser atingido o instante  $t = 155.5s$ , a partir do qual desaparecem juntamente com as recirculações. Para o instante de velocidade máxima ( $t = 156.5s$ ) existe apenas uma região larga de tensões negativas no centro da geometria e a partir deste instante novamente observa-se uma estabilização do escoamento.

Comparativamente aos outros, o campo de  $N_1$  não sofre grandes alterações no tempo. Como em muitos dos casos em regime estacionário são identificadas zonas de tensões junto às paredes da geometria e também na periferia das recirculações que aumentam em intensidade até ser atingido o instante  $t = 156s$  onde já só são identificadas tensões numa das paredes de cada canal de saída.



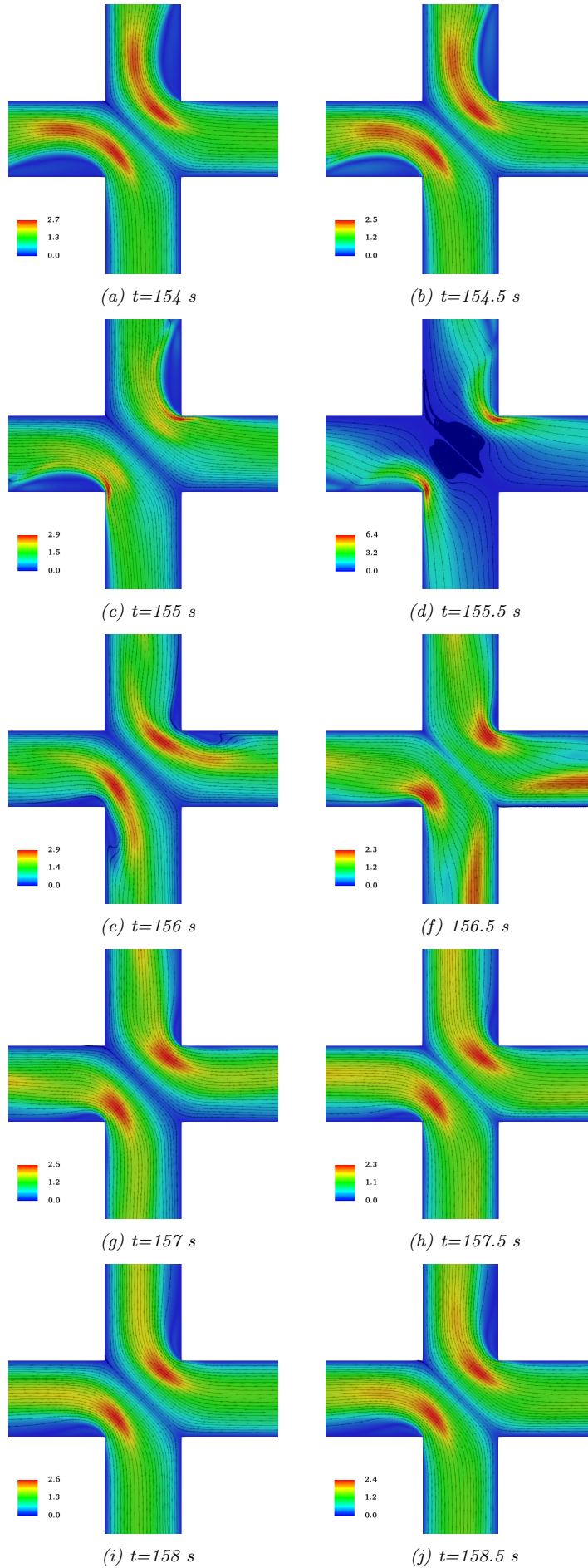


Figura 6.31: Variação do mapa de  $\|u\|/U$  ao longo do tempo, para o modelo UCM a  $Wi=2$ .

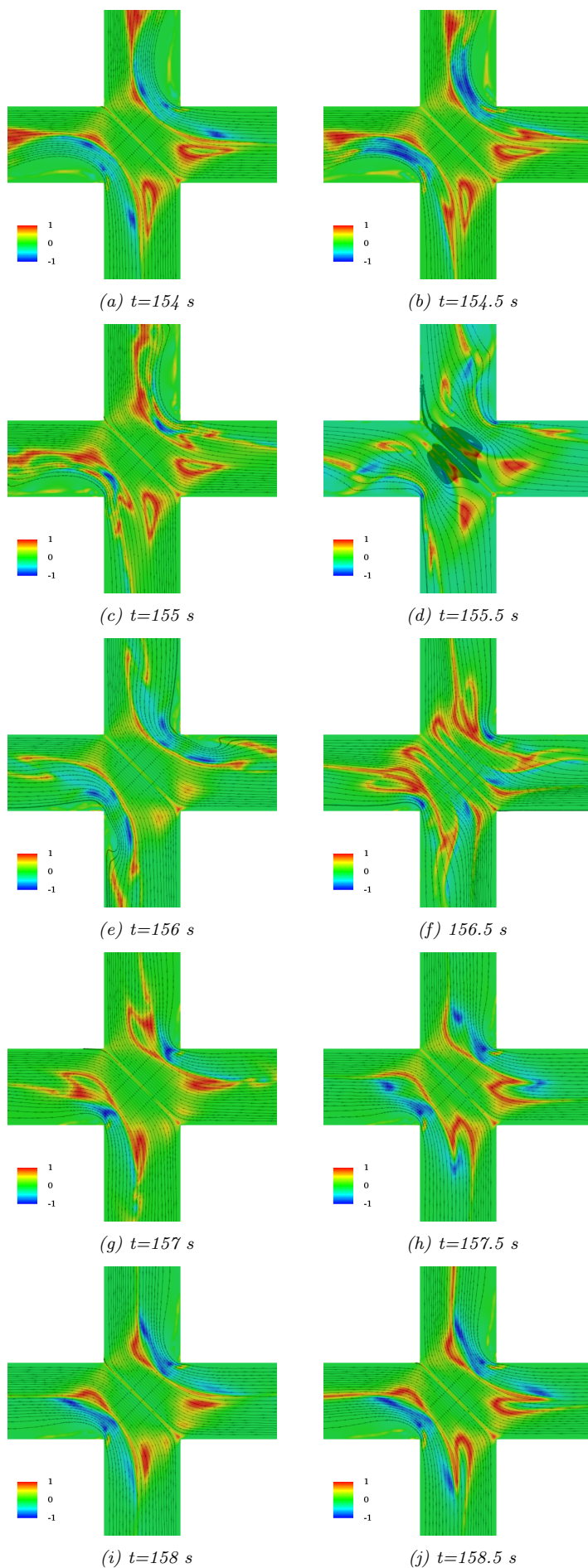


Figura 6.32: Variação do mapa de  $(\xi)$  ao longo do tempo, para o modelo UCM a  $Wi=2$ .

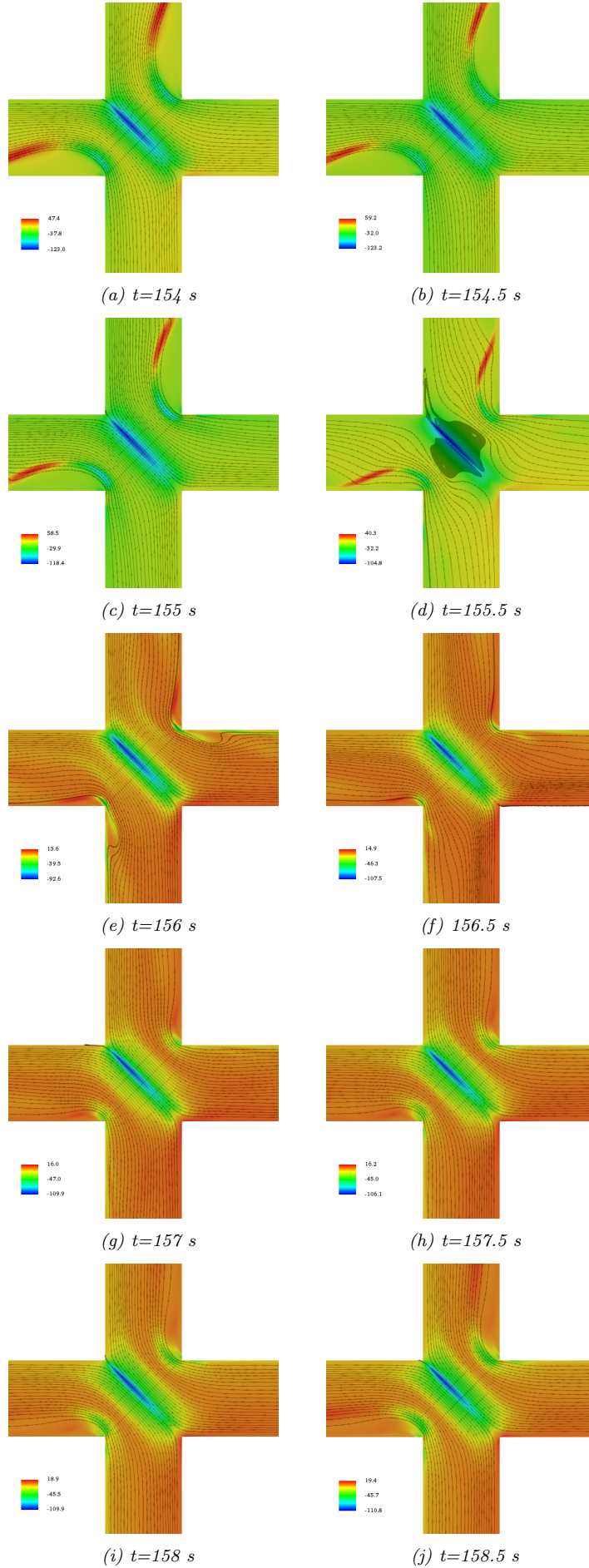


Figura 6.33: Variação do mapa de  $\tau_{xy}/[\eta U/H]$  ao longo do tempo, para modelo UCM a  $Wi=2$

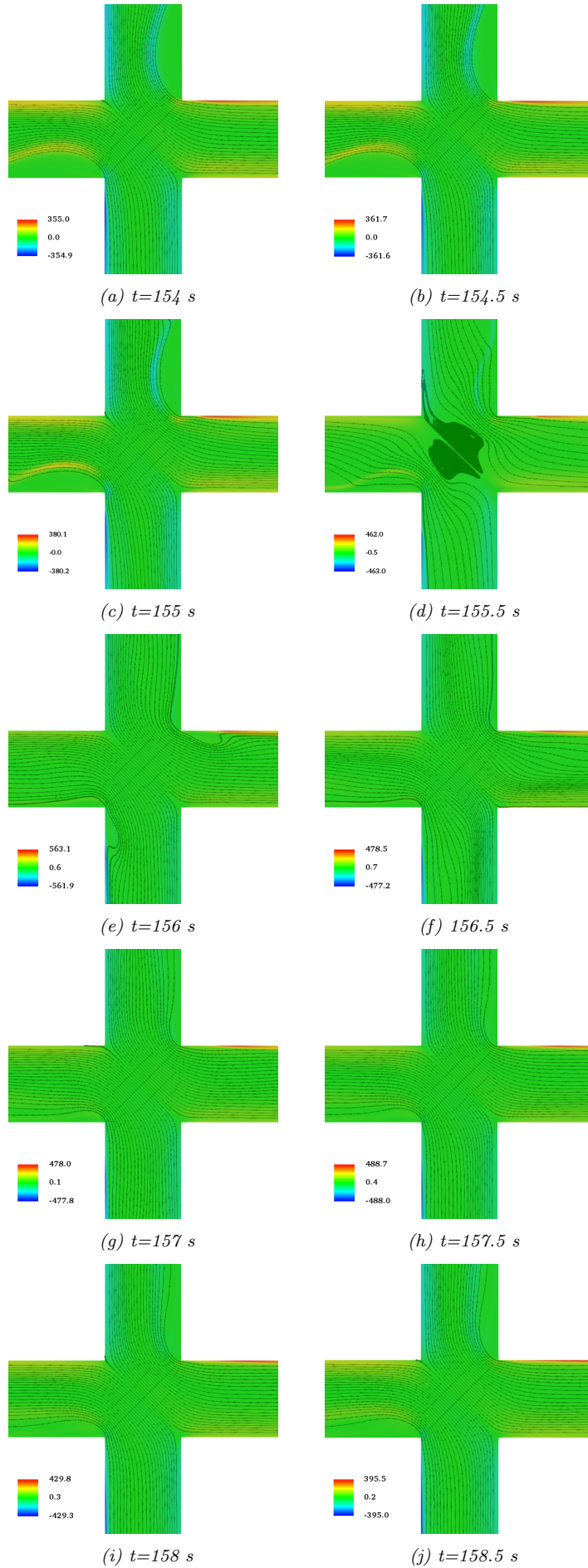


Figura 6.34: Variação do mapa de  $N_1/[\eta U/H]$  ao longo do tempo, para o modelo UCM a  $Wi=2$

### 6.3.2 Modelo Oldroyd-B - $\beta = 0.1$

A análise dos escoamentos em regime estacionário já nos mostrou que a introdução de um solvente viscoso tem um papel estabilizador em quase todos os efeitos provocados pela elasticidade do fluido. Como era esperado, o mesmo ocorre em regime não-estacionário, notando-se uma acentuada redução das oscilações para valores de elasticidade muito próximos dos apresentados para o modelo UCM.

Relativamente ao primeiro caso, onde começam as instabilidades ( $Wi = 1.625$ ), são novamente apresentados os gráficos de variação de  $u_x/U$  e o correspondente domínio de frequências na figura 6.35(a). Aqui podem ser identificadas duas frequências, sendo que uma é harmónica e o dobro da frequência fundamental e em termos de amplitude existem semelhanças com os valores correspondentes de  $Wi$  no modelo UCM.

A figura 6.35(b) mostra os mesmos resultados para  $Wi = 1.7$ . Curiosamente, o aumento de  $Wi$  causa uma ligeira redução na amplitude das oscilações, ou seja, é o primeiro caso em que a amplitude diminui com o aumento da elasticidade. Em relação ao domínio de frequências a única alteração visível é a redução da potência.

Ao aumentarmos o número de Weissenberg para 1.8 já é notável, na figura 6.35(c) um aumento nas instabilidades do escoamento, no entanto, nada comparável às oscilações observadas no modelo UCM, para um fluido com a mesma elasticidade. É aqui que se verifica novamente o efeito estabilizador que a introdução do parâmetro  $\beta$  tem no escoamento. No domínio de frequência surgem novas harmónicas que são múltiplos da frequência fundamental e também uma sub-harmónica que é metade da fundamental. Novamente vemos um aumento na amplitude das oscilações com a elasticidade.

No último caso é possível ver na figura 6.35(d) que, apesar do aumento de  $Wi$  para 2, não são observáveis grandes alterações no gráfico de variação temporal de  $u_x/U$ . No entanto, a amplitude das oscilações de facto aumenta e surgem também novas frequências fortes.

Resumidamente, a introdução do solvente Newtoniano estabiliza os fenómenos elásticos ocorrentes e não só no regime estacionário. Como podemos ver, para valores idênticos de  $Wi$ , são bastante mais pronunciadas as oscilações no modelo UCM do que no modelo Oldroyd-B ( $\beta = 0.1$ ) e são identificadas mais harmónicas.

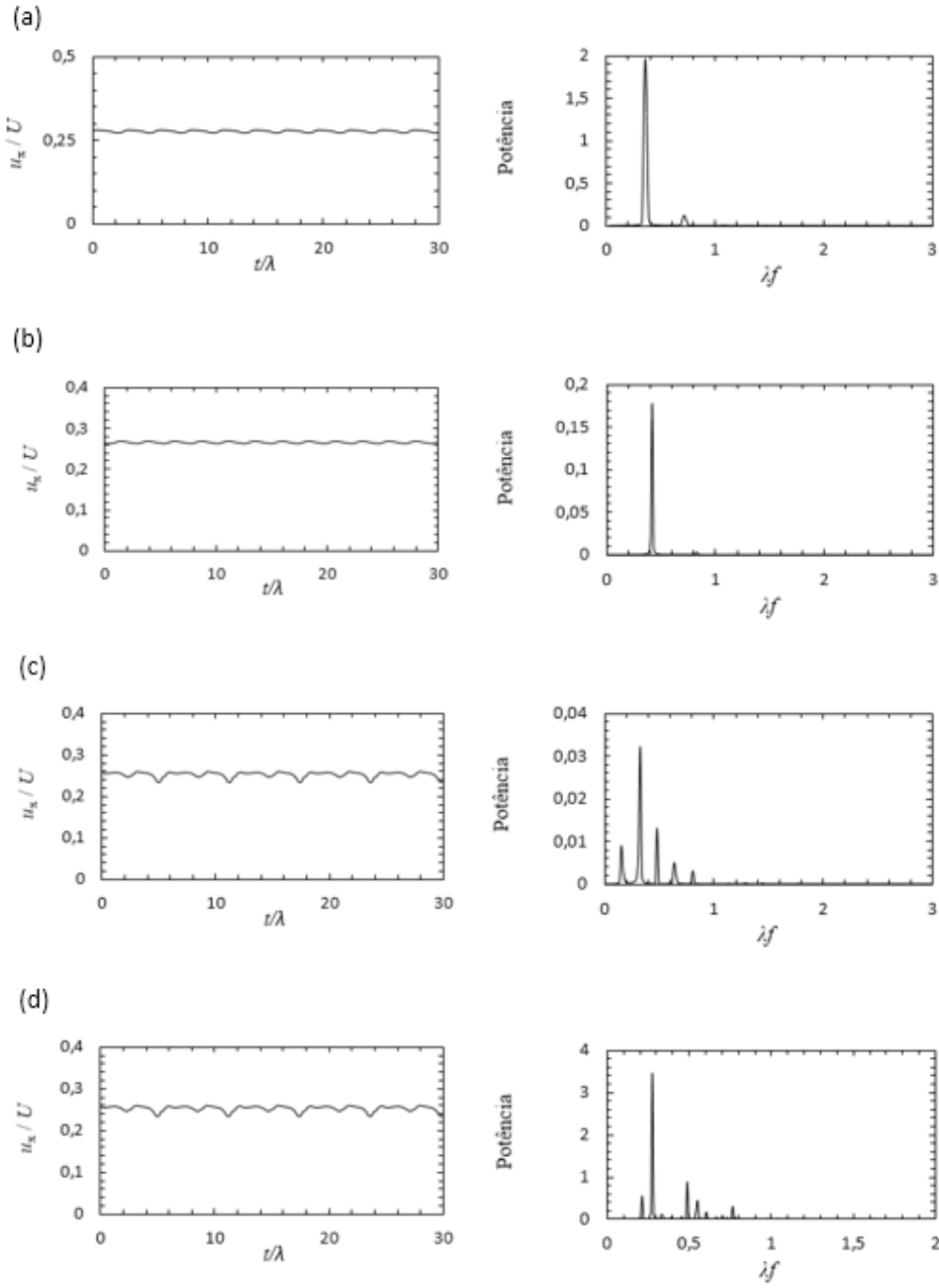


Figura 6.35: Variação da componente horizontal da velocidade no ponto  $(x = 0; y = 0)$  e correspondente domínio da frequência para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.1$ ) a (a)  $Wi=1.625$  (crítico), (b)  $Wi=1.7$ , (c)  $Wi=1.8$  e (d)  $Wi=2$ .

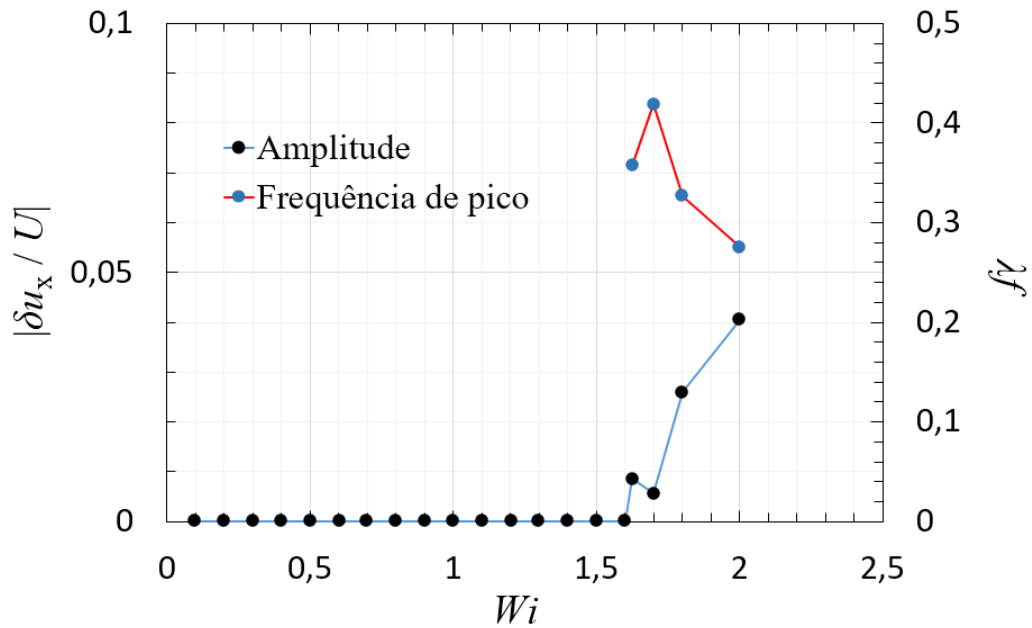


Figura 6.36: Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo Oldroyd-B ( $\beta = 0.1$ ) em função do número de Weissenberg.

A figura 6.36 mostra-nos como a amplitude das oscilações tende novamente a aumentar com a elasticidade, com um pequeno desvio, apesar de atingir valores muito mais reduzidos que no modelo UCM.

### 6.3.3 Oldroyd-B - $\beta = 0.5$

Aumentando o parâmetro  $\beta$ , torna-se mais evidente a redução dos efeitos elásticos.

Para o valor crítico de Weissenberg ( $Wi = 2.05$ ) a amplitude das oscilações é bastante baixa, como se observa na figura 6.37(a) e no domínio de frequência é identificada apenas uma harmónica.

Quando aumentamos o número de Weissenberg para valores de  $Wi = 2.1, 2.2$  e  $2.3$  a amplitude das oscilações aumenta insignificativamente e é bastante inferior aos valores obtidos para os modelos UCM e Oldroyd-B ( $\beta = 0.1$ ). A cada uma destas 3 diferentes elasticidades corresponde uma harmónica de frequência adimensional relativamente igual, representada nas figuras 6.37(b), (c) e (d).

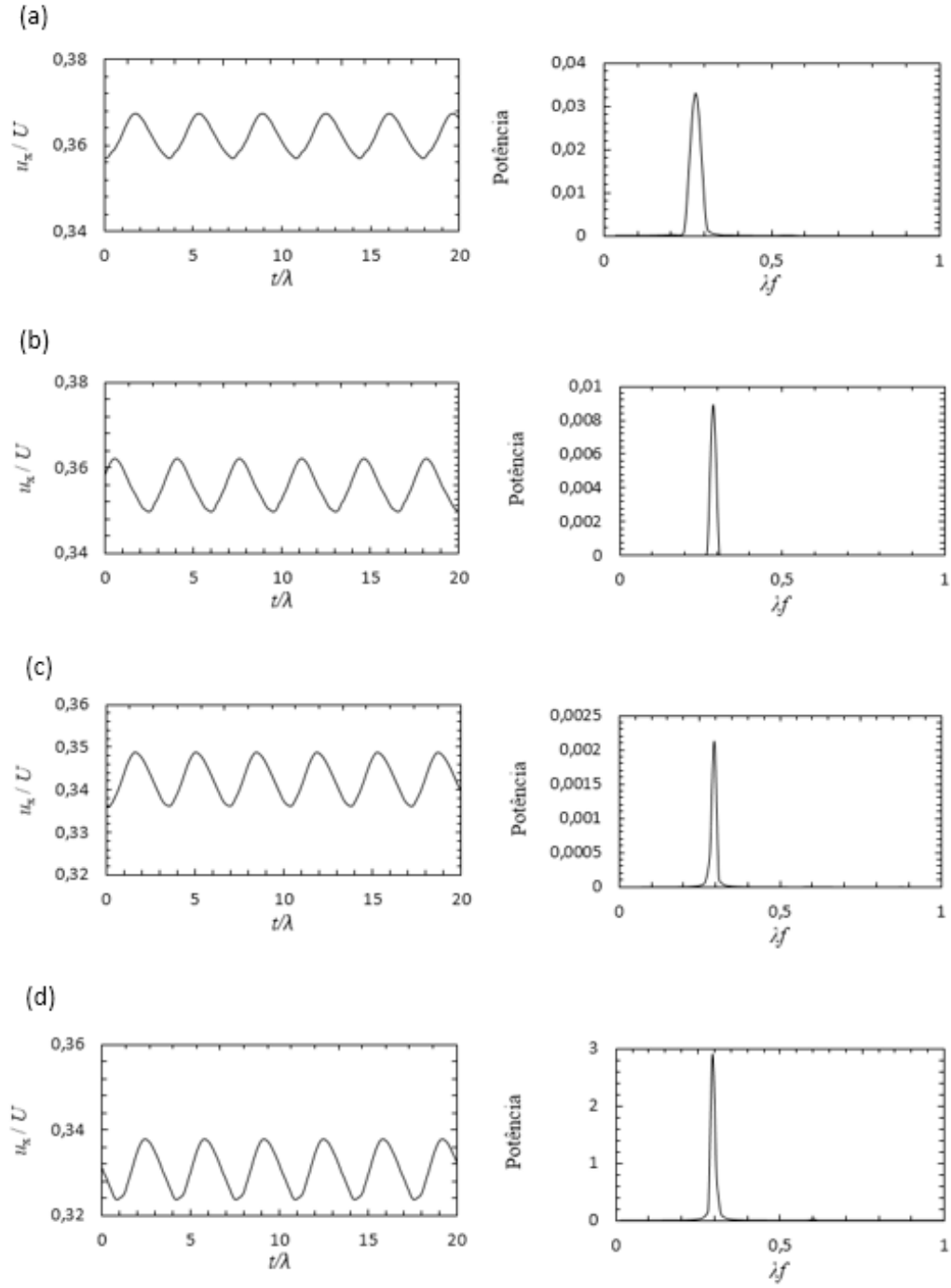


Figura 6.37: Variação da componente horizontal da velocidade no ponto  $(x = 0; y = 0)$  e correspondente domínio da frequência para o modelo Oldroyd-B ( $\beta=0.5$ ) a (a)  $Wi=2.05$  (crítico), (b)  $Wi=2.1$ , (c)  $Wi=2.2$  e (d)  $Wi=2.3$ .



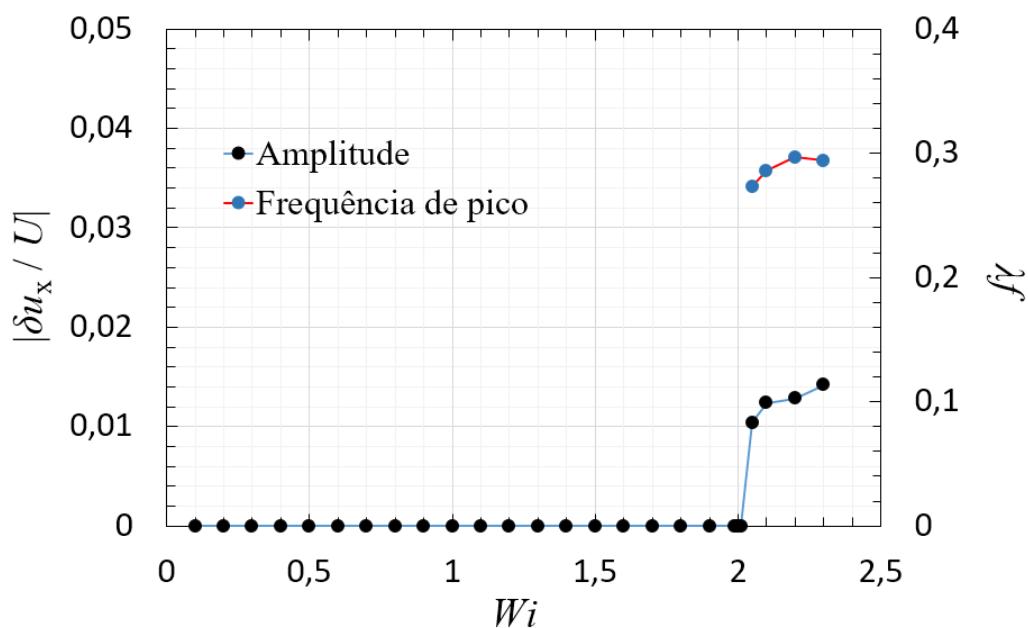


Figura 6.38: Variação das frequências dominantes e da amplitude da componente horizontal da velocidade para o modelo Oldroyd-B ( $\beta = 0.5$ ) em função do número de Weissenberg.

Como já referido e pode ser observado na figura 6.38 a amplitude aumenta novamente com a elasticidade apesar de, tal como no caso anterior, o solvente reduzir significativamente estes valores. Quanto ao comportamento das frequências fundamentais com a elasticidade, esse ainda é uma incógnita.

Neste caso, grande parte dos efeitos elásticos é neutralizada e seria necessário avaliar escoamentos com valores de  $Wi$  superiores de modo a descobrir se o escoamento complexo observado no modelo UCM (para  $Wi = 1.8$  e 2) existe e pode ser simulado para fluidos Oldroyd-B.



## Capítulo 7

# Conclusões

O presente estudo iniciou-se com o intuito de avaliar fenómenos puramente elásticos em escoamentos de fluidos viscoelásticos numa micro bifurcação *cross-slot*, com uma configuração de entradas de caudal em canais adjacentes, o que difere do caso mais comum da literatura em que o escoamento entra em canais opostos.

O objetivo principal seria avaliar o escoamento de fluidos com progressivamente maior elasticidade de modo a descobrir as características destes escoamentos e verificar se ocorrem os dois tipos de instabilidades previamente reportadas descobrindo os valores críticos de elasticidade a partir dos quais estes fenómenos ocorrem. Foi efetuada uma análise numérica com os modelos constitutivos UCM, Oldroyd-B e sPTT, de modo a analisar também qual o efeito que a adição de um solvente viscoso ou a imposição de um limite extensional molecular possam ter nestas instabilidades e no comportamento geral do escoamento.

Relativamente à primeira instabilidade reportada na literatura [3, 4], uma transição de escoamento estacionário simétrico para escoamento estacionário assimétrico, esta não foi observada em nenhum dos resultados obtidos. Isto pode ser explicado tomando como válida a analogia efetuada por Poole et al. [4], que caracteriza a assimetria ocorrente no seu estudo (bifurcação *cross-slot* típica) como uma resposta do escoamento à natureza altamente compressiva imposta nas partículas a montante do ponto de estagnação, comparando-a ao sucedido nos fenómenos de "buckling" observados em vigas e jatos de fluidos viscosos. Uma vez que a configuração de caudais de entrada é alterada para o escoamento neste estudo, o ponto de estagnação já não corresponde ao centro geométrico da bifurcação, deslocando-se para o vértice inferior direito. Apesar de ainda existir um escoamento altamente compressível a montante do ponto de estagnação, o escoamento passa a ser do tipo corte (*shear*) a jusante deste ponto e não se chega a instalar nenhum escoamento assimétrico estável.

Quanto à segunda instabilidade, referente à transição do escoamento de regime estacionário para escoamento dependente do tempo (oscilatório), esta foi detetada para todos os modelos testados e o valor crítico do número de Weissenberg para o qual surge este fenómeno variou consideravelmente de modelo para modelo.

Analisando o comportamento dos escoamentos antes de surgirem instabilidades foi possível observar certas anomalias de natureza elástica. O aumento de  $Wi$  no modelo UCM traduziu-se no surgimento de recirculações nos braços de entrada, um aumento da separação dos escoamentos no centro da bifurcação, como também

o surgimento de elevadas tensões de corte negativas nesta região. Na zona do ponto de estagnação foram também detetadas altas tensões de corte positivas relacionadas com elevadas taxas de deformação. A introdução do solvente viscoso com o modelo Oldroyd-B provou ter um efeito estabilizador, não só nos efeitos elástico relatados mas também no surgimento de instabilidades, uma vez que o valor crítico do número de Weissenberg tende a aumentar com o aumento de  $\beta$ . Certos fenómenos, como a difusão das tensões positivas através das paredes a jusante do ponto de estagnação, aumentam com a elasticidade mas não são afetadas pelo solvente, pelo menos diretamente, uma vez que este possibilita escoamentos estáveis para maiores elasticidades. A introdução do parâmetro  $\varepsilon$  com o modelo sPTT, causou uma diminuição bastante mais acentuada nos efeitos elásticos, especialmente no surgimento de instabilidades, sendo que o  $Wi$  toma valores bastante mais elevados. Simulações efetuadas com  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\beta = 0.2$  e  $Wi = 100$  demonstraram escoamentos estacionários, pelo que as limitações computacionais impediram a continuação do estudo para valores superiores de  $\varepsilon$ .

Para trabalhos futuros é aconselhável uma investigação mais profunda da presente configuração utilizando o modelo sPTT, de modo a finalizar os gráficos de estabilidade deste estudo que estão, de facto, incompletos.

Analisando também os escoamentos em regime não-estacionário, observou-se no caso do modelo UCM que para valores de  $Wi$  próximos do valor crítico as oscilações do escoamento são harmónicas com frequências bem definidas e que o aumento da elasticidade implica o surgimento de mais frequências e maiores amplitudes das oscilações, tornando o escoamento muito mais complexo. Novamente vemos que a introdução de um solvente viscoso tem um papel estabilizador, sendo que as oscilações são mais reduzidas para valores semelhantes de  $Wi$ .

No futuro seria também aconselhável um estudo mais intensivo do regime não-estacionário, para valores superiores de  $Wi$ , podendo assim ter uma melhor compreensão de como a amplitude e as frequências destas oscilações variam com  $Wi$  e também para geometrias tridimensionais.

# Bibliografia

- [1] F. Pimenta and M. A. Alves. Stabilization of an open-source finite-volume solver for viscoelastic fluid flows. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 239:85–104, 2017.
- [2] A. Afonso. Further developments on theoretical and computational rheology. Tese de doutoramento, FEUP, 2013.
- [3] P. E. Arratia, C. C. Thomas, J. D. Diorio, and J. P. Gollub. Elastic Instabilities of Polymer Solutions in Extensional Flows. Bulletin of the American Physical Society, pages 1–4, 2006.
- [4] R. J. Poole, M. A. Alves, and P. J. Oliveira. Purely elastic flow asymmetries. Physical Review Letters, 99(16):164503, 2007.
- [5] R. J. Poole, M. A. Alves, A. P. Afonso, F. T. Pinho, and P. J. Oliveira. Purely-elastic flow instabilities in a microfluidic cross-slot geometry. AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings, 2007.
- [6] R. J. Poole, M. A. Alves, A. Afonso, F. T. Pinho, and P. J. Oliveira. Purely elastic instabilities in a cross-slot flow. In The Society of Rheology 79th Annual Meeting, Salt Lake City,, 2007.
- [7] M. S. N. Oliveira, F. T. Pinho, R. J. Poole, P. J. Oliveira, and M. A. Alves. Purely elastic flow asymmetries in flow-focusing devices. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 160(1):31–39, 2009.
- [8] P. C. Sousa, F. T. Pinho, M. S. N. Oliveira, and M. A. Alves. Purely elastic flow instabilities in microscale cross-slot devices. Soft Matter, 11(45):8856–8862, 2015.
- [9] P. Ballesta and M. A. Alves. Purely elastic instabilities in a microfluidic flow focusing device. Physical Review Fluids, 2(5):053301, 2017.
- [10] A. Varshney, E. Afik, Y. Kaplan, and V. Steinberg. Oscillatory elastic instabilities in an extensional viscoelastic flow. Soft Matter, 12:2186–2191, 2015.
- [11] L. F. Richardson. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character, 210:307–357, 1911.

- [12] J. C. Maxwell. On the Dynamical Theory of Gases. In Philosophical Transactions of the Royal Society of London, volume 157, page 40. Royal Society of London, 1867.
- [13] J. G. Oldroyd. On the Formulation of Rheological Equations of State. Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 200(1063):523–541, 1950.
- [14] N. Phan-Thien and R. I. Tanner. A New Constitutive Equation Derived From Network Theory. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2:353–365, 1977.
- [15] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics. John Wiley and Sons Inc., New York, NY, 1987.
- [16] N. Phan-Thien. A Nonlinear Network Viscoelastic Model. Journal of Rheology, 22(3):259–283, 1978.
- [17] J. Remmelgas, P. Singh, and L. G. Leal. Computational studies of nonlinear elastic dumbbell models of Boger fluids in a cross-slot flow. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 88(1-2):31–61, 1999.
- [18] Arjen C. B. Bogaerds, Wilco M. H. Verbeeten, Gerrit W. M. Peters, and Frank P. T. Baaijens. 3D Viscoelastic analysis of a polymer solution in a complex flow. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 180(3-4):413–430, 1999.
- [19] F. A. Cruz, R. J. Poole, A. M. Afonso, F. T. Pinho, P. J. Oliveira, and M. A. Alves. A new viscoelastic benchmark flow: Stationary bifurcation in a cross-slot. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 214:57–68, 2014.
- [20] S. J. Haward, M. S. N. Oliveira, M. A. Alves, and G. H. McKinley. Optimized cross-slot flow geometry for microfluidic extensional rheometry. Physical Review Letters, 109(12):128301, 2012.
- [21] A. S. Cavadas. Hidrodinâmica de jatos de impacto confinados escoamento de fluidos newtonianos e não newtonianos. Tese de doutoramento, FEUP, 2008.
- [22] F Pimenta and M A Alves. RheoTool User Guide. 2016.
- [23] C J Greenshields. OpenFOAM User Guide, volume 4. OpenFOAM Foundation Ltd., 2016.
- [24] J. H. Ferziger and M. Perić. Further discussion of numerical errors in CFD. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 23(12):1263–1274, 1996.



## Apêndice A

# Ficheiros do *rheoFOAM*

### A.1 *blockMeshDict*

```
| ===== |
| \\      / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\      / O peration     | Version: 2.2.2 |
| \\      / A nd           | Web: www.OpenFOAM.org |
| \\      / M anipulation  | |
|*-----*|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       blockMeshDict;
}
// *****

convertToMeters 1;

vertices
(
    (-10 -0.5 0)
    (-0.5 -0.5 0)
    (-0.5 -10 0)
    (0.5 -10 0)
    (0.5 -0.5 0)
    (10 -0.5 0)
    (10 0.5 0)
    (0.5 0.5 0)
    (0.5 10 0)
    (-0.5 10 0)
    (-0.5 0.5 0)
    (-10 0.5 0) // 11

    (-10 -0.5 1) //12
    (-0.5 -0.5 1)
    (-0.5 -10 1)
    (0.5 -10 1)
    (0.5 -0.5 1)
    (10 -0.5 1)
    (10 0.5 1)
    (0.5 0.5 1)
    (0.5 10 1)
    (-0.5 10 1)
    (-0.5 0.5 1)
    (-10 0.5 1) // 21
```



```

blocks
(
    hex (0 1 10 11 12 13 22 23) (60 51 1) simpleGrading (0.04 1 1) //1
    hex (2 3 4 1 14 15 16 13) (51 60 1) simpleGrading (1 0.04 1) //2
    hex (4 5 6 7 16 17 18 19) (60 51 1) simpleGrading (25 1 1) //3
    hex (10 7 8 9 22 19 20 21) (51 60 1) simpleGrading (1 25 1) //4
    hex (1 4 7 10 13 16 19 22) (51 51 1) simpleGrading (1 1 1) //8

);

edges
(
);

boundary
(
    inlet_north
    {
        type patch;
        faces
        (
            (9 8 20 21)
        );
    }

    outlet_south
    {
        type patch;
        faces
        (
            (2 3 15 14)
        );
    }

    outlet_east
    {
        type patch;
        faces
        (
            (5 6 18 17)
        );
    }

```

```

inlet_west
{
    type patch;
    faces
    (
        (0 11 23 12)
    );
}

walls
{
    type wall;
    faces
    (
        (0 1 13 12)
        (2 1 13 14)
        (3 4 16 15)
        (4 5 17 16)
        (7 6 18 19)
        (7 8 20 19)
        (10 9 21 22)
        (11 10 22 23)
    );
}

frontAndBack
{
    type empty;
    faces
    (
        (0 1 10 11)
        (2 3 4 1)
        (4 5 6 7)
        (10 7 8 9)
        (1 4 7 10)

        (12 13 22 23)
        (14 15 16 13)
        (16 17 18 19)
        (22 19 20 21)
        (13 16 19 22)
    );
}

);

mergePatchPairs
(
);

// *****

```

## A.2 *boundary*

```

/*-----*- C++ -*-----*/
|=====|
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 2.2.2 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
/*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        polyBoundaryMesh;
    location     "constant/polyMesh";
    object       boundary;
}
// *****

6
(
    inlet_north
    {
        type            patch;
        nFaces          51;
        startFace       29340;
    }
    outlet_south
    {
        type            patch;
        nFaces          51;
        startFace       29391;
    }
    outlet_east
    {
        type            patch;
        nFaces          51;
        startFace       29442;
    }
)

```

```
inlet_west
{
    type          patch;
    nFaces        51;
    startFace     29493;
}
walls
{
    type          wall;
    nFaces        480;
    startFace     29544;
}
frontAndBack
{
    type          empty;
    inGroups      1(empty);
    nFaces        29682;
    startFace     30024;
}
)

// ***** //
```

### A.3 *constitutiveProperties*

```

/*-----*- C++ -*-----*/
| ===== |
| \\      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\      / O peration  | Version:  2.2.2                      |
| \\      / A nd        | Web:      www.OpenFOAM.org           |
| \\      / M anipulation |                                     |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       constitutiveProperties;
}
// *****

parameters
{
    .....
    type          Oldroyd-BLog;

    rho           rho [1 -3 0 0 0 0 0] 1;
    etaS           etaS [1 -1 -1 0 0 0 0] 0;
    etaP           etaP [1 -1 -1 0 0 0 0] 1;
    lambda         lambda [0 0 1 0 0 0 0] 0.1;

    uTauCoupling  true;
}

passiveScalarProperties
{
    .....
    solvePassiveScalar  on;
    D                   D [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 0.002;
}

// *****

```

## A.4 *controlDict*

```

/*-----*- C++ -*-----*/
|  =====  |
|  \ \      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
|  \ \      /  O peration  | Version:  2.2.2                      |
|  \ \      /  A nd        | Web:      www.OpenFOAM.org           |
|  \ \      /  M anipulation |                                     |
|  \ \      /               |                                     |
/*-----*- C++ -*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       controlDict;
}

// *****

application      rheoFoam;

startFrom        startTime;

startTime        0;

stopAt           endTime;

endTime          70;

deltaT           .01;

writeControl     timeStep;

writeInterval    1000;

purgeWrite       0;

writeFormat      ascii;

writePrecision   12;

```

```

writeCompression compressed;

timeFormat      general;

timePrecision    10;

graphFormat      raw;

runTimeModifiable yes;

adjustTimeStep on;

maxCo            0.4;

maxDeltaT        0.1;

functions
{
    outputWi0
    {
        functionObjectLibs ("libutilityFunctionObjects.so");
        type coded;
        redirectType calWi0;
        outputControl timeStep;
        outputInterval      50;
        enabled              yes;

        code
        #{
            // Lookup/create variable

            const volVectorField& U = mesh().lookupObject<volVectorField>("U");

            const dictionary& constDict = mesh().lookupObject<IOdictionary>("constitutiveProperties");
            dimensionedScalar lambda_(constDict.subDict("parameters").lookup("lambda"));

            scalarList list;

            // Compute cd

            // Find cell at stagnation point

            label cellC = mesh().findCell(vector(0,0,0.5));

            volTensorField gradU = fvc::grad(U);

            list.append(mesh().time().value()); // Time (col 0)
            list.append(Foam::sqrt( gradU[cellC].xx() * gradU[cellC].xx() + gradU[cellC].yx() * gradU[cellC].xy() ) * lambda_.value() );

            // Write data

            string comsh;
            string filename("Wi0.txt");
            std::stringstream doub2str; doub2str.precision(12);

            comsh = "/writeData " + filename;
            forAll(list, id)
            {
                doub2str.str(std::string());
                doub2str << list[id];
                comsh += " " + doub2str.str();
            }

            if (Pstream::parRun())
            {
                for (label procI = 0; procI < Pstream::nProcs(); procI++)
                {
                    if (procI == Pstream::myProcNo())
                    {
                        if (cellC!=-1)
                        {
                            system(comsh);
                        }
                    }
                }
            }
        }
    }
}

```

```

    }
    #};
}
streamLine1
{
    type            streamLine;
    libs            ("libfieldFunctionObjects.so");

    writeControl     writeTime;

    setFormat        vtk;
    trackForward     yes;
    fields
    (
        U
        p
    );
    lifeTime         10000;
    trackLength       1e-3;
    nSubCycle         5;
    bounds            (0.2 -10 -10) (0.22 10 10);
    cloudName         particleTracks;
    seedSampleSet     uniform;
    uniformCoeffs
    {

```

```

        type            uniform;
        axis             x; //distance;
        start            (-10 -10 0.5);
        end              (10 10 0.5);
        nPoints          100;
    }
}

```

```
// ***** //
```



## A.5 *fvSchemes*

```

/*-----*- C++ -*------*/
|=====|
|  \ \   /   F i e l d           | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
|  \ \   /   O p e r a t i o n    | Version:  2.2.2                      |
|  \ \   /   A n d                 | Web:      www.OpenFOAM.org          |
|  \ \   /   M a n i p u l a t i o n |                                     |
|-----|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       fvSchemes;
}
// *****

ddtSchemes
{
    default      Euler;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
    grad(p)      Gauss linear;
    grad(U)      Gauss linear;
    extSTGrad    Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;
    div(tau)     Gauss linear;
    div(grad(U)) Gauss linear;
    div(phi,U)   GaussDefCmpw none;
    div(phi,C)   GaussDefCmpw cubista;
    div(phi,theta) GaussDefCmpw cubista;
    div(phi,tau) GaussDefCmpw cubista;
}

```

```
laplacianSchemes
{
    default                none;
    laplacian(eta,U)        Gauss linear orthogonal;
    laplacian(p| (ap-H1))   Gauss linear orthogonal;
    laplacian(D,C)          Gauss linear orthogonal;
}

interpolationSchemes
{
    default                linear;
}

snGradSchemes
{
    default                orthogonal;
}

fluxRequired
{
    default                no;
    p;
}

// ***** //
```

## A.6 *fvSolution*

```

/*----- C++ -----*/
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 2.2.2 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
/*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       fvSolution;
}
// ***** //

solvers
{
    "(p|U)"
    {
        solver          PCG;
        preconditioner   DIC;
        tolerance        1e-10;
        relTol           0.001;
        minIter          0;
        maxIter          800;
    }

    "(theta|tau|C)"
    {
        solver          PBiCG;
        preconditioner
        {
            preconditioner DILU;
        }
    }
}

```

```

        tolerance      1e-10;
        relTol         0.001;
        minIter        0;
        maxIter        1000;
    }
}

SIMPLE
{
    nInIter            1;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    pRefCell           0;
    pRefValue          0;

    residualControl
    {
    }
}

relaxationFactors
{
    fields
    {
        p            1;
    }
    equations
    {
        U            1;
        tau          1;
        theta        1;
        C            1;
    }
}

// ***** //
```